

TESIS DE MAESTÍA EN FÍSICA

**OPTIMIZACIÓN DE LA RENORMALIZACIÓN
NUMÉRICA UTILIZANDO INFORMACIÓN
CUÁNTICA: APLICACIÓN A MODELOS DE UNA
IMPUREZA INTERACTUANTE**

Diego Flores Marozzi

Dra. Karen Hallberg
Director

Miembros del Jurado

Dr. Pablo Cornaglia - Dra. Marina Huerta - Dr. Adrián Budini

Diciembre de 2017

Teoría de la Materia Condensada – Centro Atómico Bariloche

Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Comisión Nacional de Energía Atómica
Argentina

A mis padres, Delia y Juan

Índice de contenidos

Índice de contenidos	v
Resumen	vii
1. Motivación y objetivo	1
2. Introducción al DMRG	3
2.1. Diagonalización exacta	4
2.2. Grupo de renormalización numérico: NRG	5
2.3. NRG en el espacio real	10
2.4. Proyección sobre la matriz densidad.	12
2.5. El grupo de renormalización con matriz densidad: DMRG	13
2.5.1. Crecimiento	14
2.5.2. Barridos	15
2.6. DMRG y entrelazamiento.	17
3. Representaciones de los sistemas de muchas partículas	21
3.1. Sistema de partículas sin espín en una red unidimensional	21
3.2. Espacio de Fourier	22
3.3. Espacio de los Orbitales Naturales	23
3.4. Estudio de los cambios de representación del sistema <i>spinless</i> con interacción a primeros vecinos	25
4. Optimización del DMRG en el estado fundamental del modelo de Anderson	29
4.1. Problema de una impureza de Anderson	30
4.2. Configuración Cadena Uniforme	30
4.3. Configuración Cadena Uniforme: Orbitales Naturales	33
4.4. Configuración Estrella	38
4.5. Configuración Estrella. Orbitales Naturales	40
4.6. Configuración Cadena de Wilson	43
4.7. Cambios en el orden de los orbitales	45

5. Optimización del DMRG en el cálculo de la dinámica del modelo de Anderson	51
5.1. Método del vector corrección para la dinámica	52
5.2. Configuración Estrella	53
5.3. Configuración Cadena Uniforme	56
5.4. Configuración Cadena de Wilson	57
6. Conclusiones	61
A. Diagonalización del Hamiltoniano por el método de Lanczos	63
B. Código del NRG para la Cadena de Wilson	65
C. Código del DMRG en serie para el Hamiltoniano de Heisenberg uni-dimensional	69
C.1. Programa en paralelo	71
Bibliografía	73
Agradecimientos	77

Resumen

El DMRG es un método numérico que sirve para calcular propiedades de sistemas de muchas partículas interactuantes. Se basa en la renormalización del espacio de Hilbert utilizando los estados más relevantes de la matriz densidad reducida. Su eficiencia depende de que el estrellamiento entre las partes del sistema sea pequeño. El objetivo de este trabajo es optimizar el DMRG utilizando técnicas de información cuántica. Esto se logra mediante el cambio de representación al espacio de los Orbitales Naturales. Esta base es interesante porque minimiza la entropía de sitio en la red. Por este motivo es apropiada para la ejecución del DMRG.

Se utilizó como objeto de estudio el modelo de una impureza de Anderson unidimensional. Se estudiaron propiedades estáticas y dinámicas con el fin de evaluar si el cambio de representación al espacio de los Orbitales Naturales reduce el costo computacional del DMRG. Se vio que el método propuesto reduce el uso de memoria y el tiempo de ejecución en todos los casos estudiados.

Estos resultados son alentadores porque indican que el espacio de los Orbitales Naturales podría utilizarse para el estudio de sistemas más complejos en los que el DMRG tradicional consume muchos recursos computacionales. Ejemplos de estos casos son: sistemas de más de una impureza, Hamiltonianos con interacciones de largo alcance y sistemas en más de una dimensión.

Palabras clave: DMRG, INFORMACIÓN CUÁNTICA, ORBITALES NATURALES

Capítulo 1

Motivación y objetivo

“La vida es hacer aproximaciones”

— Gonzalo Usaj, 2016

En este trabajo se estudian sistemas cuánticos de muchas partículas interactuantes. Este tipo de problemas son de gran dificultad y, por lo general, no tienen solución analítica. Para poder estudiarlos es necesario realizar aproximaciones de manera conveniente.

La complejidad del estudio de estos sistemas impulsó el desarrollo de métodos cada vez más sofisticados de física computacional. Típicamente se trata de problemas que tienen complejidad exponencial, es decir, la cantidad de información que es necesario almacenar y procesar crece exponencialmente con el tamaño del sistema.

Existen distintos métodos para tratar este tipo de modelos. Entre ellos están los que se basan en promediar las contribuciones de partículas individuales y obtener una contribución efectiva. Ejemplos de estos métodos son teoría de campo medio (MFT), campo medio dinámico (DMFT) y teoría de la funcional densidad (DFT). Por otro lado, existen los métodos que utilizan el concepto de renormalización. Estos se basan en comprimir información. Ejemplos de este tipo son el grupo de renormalización numérico (NRG) y el grupo de renormalización con matriz densidad (DMRG). Estos métodos se nutren de conceptos de información cuántica.

Los métodos basados en renormalización surgieron con el NRG. El éxito de este método en la resolución de problemas de una impureza hizo que se intentase aplicar a otro tipo de sistemas, pero esto no tuvo buenos resultados. El DMRG apareció para corregir los problemas que presenta el NRG. A partir de ahí, se ha convertido en el método más efectivo para estudiar sistemas correlacionados en una dimensión.

El objetivo es proponer una manera de incrementar la eficiencia del DMRG utilizando los conceptos de información cuántica. La propuesta consiste en realizar un cambio de representación del sistema original al espacio de los Orbitales Naturales y comparar la ejecución del método en ambas representaciones. Para esto se utiliza como ejemplo

el modelo de una impureza de Anderson en una dimensión y se estudian propiedades del estado fundamental y de la dinámica a temperatura cero.

La estructura de esta tesis es la siguiente: en el capítulo 2 se presenta el método DMRG. Se explica el concepto de renormalización y el de entropía de entrelazamiento. Además, para familiarizarse con el método, se estudian propiedades del modelo de Heisenberg unidimensional. En el capítulo 3 se presenta el cambio de representación al espacio de los Orbitales Naturales. Se demuestra que esta es la representación que minimiza la entropía de entrelazamiento de los sitios con el resto de la red. En el capítulo 4 se calculan propiedades del estado fundamental del modelo de Anderson. Esto se hace con el objetivo de comparar la eficiencia del método en el espacio original con el de los Orbitales Naturales. En el capítulo 5 se hace un estudio parecido al anterior, pero teniendo en cuenta las propiedades de la dinámica a temperatura cero del sistema. Por último, en el capítulo 6 se muestran las conclusiones.

Capítulo 2

Introducción al DMRG

El grupo de renormalización con matriz densidad, DMRG por sus siglas en inglés, fue creado por Steve White en 1992 [1], y se ha convertido en el método más eficiente para realizar cálculos precisos de propiedades estáticas, dinámicas y termodinámicas de sistemas de muchas partículas interactuantes en una dimensión. Sus aplicaciones abarcan temas más allá de la materia condensada. Entre ellos se encuentran la química cuántica, teoría de la información cuántica, física nuclear y de altas energías [2].

El origen del DMRG se encuentra en el grupo de renormalización numérico, NRG por sus siglas en inglés, creado por Kenneth Wilson en 1975 [3]. Este método es muy importante porque se aplica con éxito a problemas de una impureza. El primer problema resuelto por el NRG fue el de una impureza magnética en un metal, denominado modelo de Kondo. Pero cuando se intenta aplicar el NRG a otros problemas, como el de Heisenberg o el de Hubbard, no se consiguen buenos resultados. El DMRG surge como una forma de mejorar el NRG para abarcar una gran cantidad de problemas.

En este capítulo se empieza por explicar el método diagonalización exacta para encontrar la energía del estado fundamental de un sistema de muchas partículas. Para esto se usa como ejemplo el modelo de la red unidimensional de espines $\frac{1}{2}$. Luego se introduce el método NRG y se explica el concepto importante de renormalización. En este caso se utiliza como ejemplo el modelo de una impureza de Anderson. A continuación se explica por qué el NRG falla al intentar resolver otro tipo de problemas como, por ejemplo, sistemas en el espacio real. Con este propósito, se expone un argumento muy simple elaborado por Noack y White. Luego se presenta la propuesta de White para corregir los problemas que presenta del NRG. Para esto se explican conceptos de matriz densidad y se introduce la terminología necesaria para estudiar el DMRG. A continuación se explica el método DMRG detallando sus pasos. En este caso, se retoma el modelo de Heisenberg unidimensional como ejemplo y se muestran resultados del DMRG aplicado a este modelo. Por último se presentan conceptos de información cuántica aplicados al DMRG. En particular, el concepto de entropía de

entrelazamiento, que es de fundamental importancia para la optimización del DMRG.

2.1. Diagonalización exacta

En esta sección se presenta el método diagonalización exacta para determinar el estado fundamental de un sistema de muchas partículas interactuantes. Para esto, se estudia un ejemplo concreto. Se utiliza como modelo una red unidimensional de N sitios con partículas de espín $\frac{1}{2}$ con condiciones de contorno abiertas. Este sistema es descrito por el Hamiltoniano de Heisenberg, el cual se muestra en la ecuación 2.1. El objetivo es encontrar la energía del estado fundamental de este sistema.

$$H = J \sum_{i=1}^{N-1} \left[S_i^z S_{i+1}^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) \right], \quad (2.1)$$

donde i es el índice de sitio y $J > 0$.

Los estados posibles para un sitio de la red son dos: $|0\rangle$, que representa una partícula con espín para abajo y $|1\rangle$ que representa una partícula con espín para arriba. Una base del espacio de Hilbert para un sitio es $B_1 = \{|0\rangle, |1\rangle\}$. El subíndice de B denota que es la base para un sitio.

La representación en esta base de los operadores que intervienen en el Hamiltoniano, es la que se muestra en la ecuación 2.2.

$$H_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, S_1^z = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, S_1^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, S_1^- = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

donde el subíndice de los operadores denota que son operadores para un sitio.

La dimensión del espacio de Hilbert es $2^1 = 2$ y el Hamiltoniano del sistema se representa con una matriz de 2×2 . En este caso, se trata de la matriz nula porque se considera que una partícula no tiene energía propia.

Para obtener un sistema de N partículas, se van agregando sitios a la red. Cuando se agregan sitios a la red, se debe calcular la nueva base asociada al nuevo espacio de Hilbert y el nuevo Hamiltoniano del sistema. Como se verá, esto va a ir aumentando la dimensión del espacio de Hilbert de manera exponencial.

Una base del espacio de Hilbert para dos sitios se puede calcular con la siguiente operación $B_2 = B_1 \otimes B_1$. Es decir, explícitamente, la base para dos sitios es $B_2 = \{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$, donde se utiliza la notación compacta $|01\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle$.

El Hamiltoniano se genera con la expresión que se muestra en la ecuación 2.3 con $p = 1$ y $q = 1$.

$$H_{p+q} = H_p \otimes I_q + I_p \otimes H_q + S_p^z \otimes S_q^z + S_p^+ \otimes S_q^- + S_p^- \otimes S_q^+, \quad (2.3)$$

donde I_p es la matriz identidad de $2^p \times 2^p$. Se ve que ahora el espacio de Hilbert tiene dimensión $2^2 = 4$ y el Hamiltoniano es una matriz de $2^2 \times 2^2$. Además, se generan los operadores que componen el Hamiltoniano como se muestra en la ecuación 2.4 con $p = 1$.

$$\begin{aligned} S_{p+1}^z &= S_p^z \otimes I_1 \\ S_{p+1}^+ &= S_p^+ \otimes I_1 \\ S_{p+1}^- &= S_p^- \otimes I_1 \end{aligned} \quad (2.4)$$

A continuación se agrega un sitio más a la red. La base que describe el nuevo espacio de Hilbert se puede calcular haciendo la operación $B_3 = B_2 \otimes B_1$. Explícitamente, la base para tres sitios es

$$B_3 = \{|000\rangle, |001\rangle, |010\rangle, |011\rangle, |100\rangle, |101\rangle, |110\rangle, |111\rangle\}.$$

El Hamiltoniano se genera con la expresión que se muestra en la ecuación 2.3 con $p = 2$ y $q = 1$. El espacio de Hilbert del sistema tiene dimensión $2^3 = 8$ y el Hamiltoniano es una matriz de $2^3 \times 2^3$. Los operadores que componen el nuevo Hamiltoniano se generan mediante la ecuación 2.4 con $p = 2$.

En general, si se agregan hasta N sitios a la red, el espacio de Hilbert del sistema va a tener dimensión 2^N y el Hamiltoniano va a ser una matriz de $2^N \times 2^N$. Es decir, el espacio de Hilbert crece exponencialmente con la cantidad de sitios.

Para resolver el problema de encontrar la energía del estado fundamental, se diagonaliza el Hamiltoniano. El menor autovalor hallado es la energía buscada. Esta diagonalización se puede realizar utilizando el método de Lanczos, que se explica en el apéndice A.

Con las capacidades computacionales actuales, este problema se puede resolver de manera exacta para sistemas de hasta $N \approx 30$ sitios. Para alcanzar tamaños de sistema más grandes, se introduce el concepto de renormalización. Para esto, en la próxima sección, se explica el método NRG.

2.2. Grupo de renormalización numérico: NRG

El método NRG fue creado por Wilson para resolver el problema de una impureza magnética en un metal. Este sistema es descrito por el modelo de Kondo. Debido al éxito que tuvo, el NRG se convirtió en el método por excelencia para resolver problemas de una impureza [4].

Los sistemas de una impureza se componen de dos sistemas cuánticos. El primero es un sistema interactuante que consta de pocos grados de libertad y se llama impureza. El segundo es un sistema no interactuante de muchos grados de libertad acoplados a la impureza y se llama baño o entorno.

El objetivo del NRG es estudiar el régimen de bajas energías del sistema en cuestión.

Para esto, trabaja en el espacio de energía del sistema. En este caso, los sitios del baño representan distintas escalas energía que decrecen con la distancia a la impureza. Esto se puede hacer porque los problemas de una impureza poseen una separación intrínseca en las escalas de energía.

La idea básica es partir de un sistema que se pueda resolver de manera exacta e ir agregando sitios integrando los grados de libertad que no son importantes para lo que se quiere calcular. Esto se hace de manera progresiva mediante transformaciones del grupo de renormalización. La idea fundamental es que sólo los estados de baja energía de un sistema de tamaño L son importantes para describir los estados de baja energía del sistema de tamaño $L + 1$. Los pasos del método son los siguientes [5]:

1. El punto de partida es considerar un sistema de tamaño L de tal manera que el Hamiltoniano H_L pueda ser diagonalizado de manera exacta. Además del Hamiltoniano, es necesario calcular los operadores que lo componen. Para introducir la terminología que se va a usar en este trabajo, se dice que los operadores calculados forman el bloque B_L .
2. El segundo paso es diagonalizar H_L y almacenar los m autoestados de más baja energía. Estos son los m autovalores asociados a los m autovectores más chicos.
3. A continuación se define una matriz de cambio de base C_L con los m autovectores ubicados en las columnas de dicha matriz. Luego se realiza la transformación de los operadores del bloque B_L por medio de la ecuación.

$$\bar{A}_L = C_L^\dagger A_L C_L, \quad (2.5)$$

donde A_L es un operador del bloque B_L . Con estos nuevos operadores se obtiene el bloque renormalizado.

4. Luego se agrega un sitio al sistema y se construye el Hamiltoniano y los operadores que lo componen. Se verán ejemplos de cómo se realiza esto. Con esto se obtiene el bloque B_{L+1} .
5. Se repiten los pasos 2 a 4 sustituyendo H_{L+1} por H_L . Un esquema representativo del método se muestra en la figura 2.1.

Típicamente, se elige que el valor de m sea el mismo para todas las iteraciones del método, es decir, los Hamiltonianos que aparecen tienen dimensión máxima $m \times m$ y no crecen exponencialmente como se vio en el ejemplo de la sección 2.1. Por este motivo, el concepto de renormalización adquiere gran importancia práctica, pues convierte un problema de complejidad exponencial en uno de complejidad lineal con el tamaño del sistema.

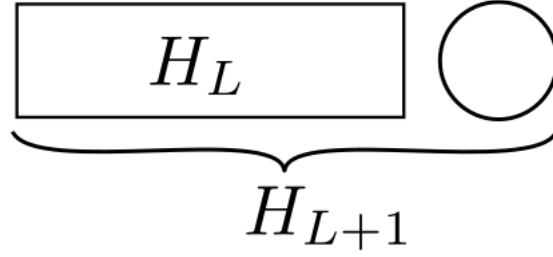


Figura 2.1: Esquema representativo de una iteración del NRG.

Para aclarar algunos aspectos del método se propone un ejemplo concreto. Se trata del modelo de Anderson unidimensional, que describe una impureza en un baño fermiónico. Este sistema será utilizado como modelo para realizar los objetivos de este trabajo. En el capítulo 4, se verá que existen distintas configuraciones para este modelo [6]. En este caso se presenta la configuración Cadena de Wilson. El Hamiltoniano se muestra en la ecuación 2.6.

$$\begin{aligned}
 H &= H_{imp} + H_{pot} + H_{kin} \\
 H_{imp} &= U \left(n_{0,\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{0,\downarrow} - \frac{1}{2} \right) \\
 H_{pot} &= \sum_{l=1}^L \sum_{\sigma} \epsilon_l c_{l,\sigma}^{\dagger} c_{l,\sigma} \\
 H_{kin} &= \sum_{l=0}^L \sum_{\sigma} \left(t_l c_{l+1,\sigma}^{\dagger} c_{l,\sigma} + h.c. \right)
 \end{aligned} \tag{2.6}$$

H_{imp} es el Hamiltoniano local de la impureza y se compone de los operadores $n_{0,\uparrow} = f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}$ y $n_{0,\downarrow} = f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\downarrow}$. Los operadores f^{\dagger} y f son los operadores de creación y destrucción en el sitio de la impureza. U es el potencial de interacción de las partículas en la impureza. H_{pot} es el término del Hamiltoniano local al baño. Los operadores c^{\dagger} y c son operadores de creación y destrucción de partículas en el baño, σ es el índice de espín, ϵ_l es la energía del sitio. H_{kin} es el término de interacción de la impureza con el baño. Se trata de un Hamiltoniano de interacción con *hopping* a primeros vecinos. Se define la discretización logarítmica para los elementos de *hopping* como se muestra en la ecuación 2.7

$$t_l = \Lambda^{-\frac{l}{2}} \tag{2.7}$$

Este tipo de discretización es la que se encarga de separar las escalas de energía del problema. Un esquema de esta configuración se muestra en la figura 2.2.

Para un sitio, existen cuatro estados posibles. Una base del espacio de Hilbert de

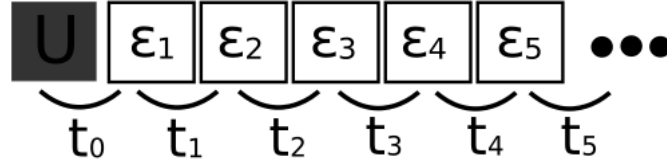


Figura 2.2: Esquema de la configuración Cadena de Wilson.

un sitio es la que se muestra en la ecuación 2.8.

$$B_1 = \{|0\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle\}, \quad (2.8)$$

donde los estados así ordenados representan un sitio sin partículas, un sitio con una partícula con espín para abajo, un sitio con una partícula con espín para arriba y un sitio con dos partículas, una con espín para abajo y la otra con espín para arriba. En este caso hay que distinguir entre el sitio de la impureza y los del baño. El Hamiltoniano de la impureza en esta base y los operadores de creación, se escriben como se muestra en la ecuación 2.9.

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{U}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{U}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, c_{\downarrow}^{\dagger} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, c_{\uparrow}^{\dagger} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

los operadores c_{\downarrow} y c_{\uparrow} se calculan transponiendo las matrices de c_{\downarrow}^{\dagger} y c_{\uparrow}^{\dagger} . El Hamiltoniano de un sitio del baño es la matriz nula de 4×4 , ya que se considera que los sitios del baño no poseen energía propia.

Además, en este caso es necesario considerar el signo fermiónico. En la base de un sitio, este es un operador que se escribe como se muestra en la ecuación 2.10.

$$sgn = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

A partir de este operador, se construyen los operadores de creación y destrucción con signo, a y b respectivamente. Estos se definen como se muestra en la ecuación 2.11.

$$\begin{aligned}
a_{\downarrow} &= c_{\downarrow}^{\dagger} \cdot \text{sgn} \\
a_{\uparrow} &= c_{\uparrow}^{\dagger} \cdot \text{sgn} \\
b_{\downarrow} &= a_{\downarrow}^{\dagger} \\
b_{\uparrow} &= a_{\uparrow}^{\dagger}.
\end{aligned} \tag{2.11}$$

Como primer paso, se elige empezar considerando un sistema compuesto por el sitio de la impureza y un sitio del baño. Para generar este sistema inicial, se une un sitio del baño a la impureza. Esto se consigue por medio de la ecuación 2.12 con $p = 1$.

$$H_{p+1} = H_p \otimes I_1 + t_p a_{\uparrow,p} \otimes b_{\uparrow,1} + t_p a_{\downarrow,p} \otimes b_{\downarrow,1} + t_p b_{\uparrow,p} \otimes a_{\uparrow,1} + t_p b_{\downarrow,p} \otimes a_{\downarrow,1}, \tag{2.12}$$

donde t_p se calcula por medio de la ecuación 2.7. Los operadores del bloque inicial se calculan como se muestra en la ecuación 2.13.

$$\begin{aligned}
a_{\downarrow,p+1} &= I_p \otimes a_{\downarrow,p} \cdot \text{sgn} \\
a_{\uparrow,p+1} &= I_p \otimes a_{\uparrow,p} \cdot \text{sgn} \\
b_{\downarrow,p+1} &= I_p \otimes \text{sgn} \cdot b_{\downarrow,p} \\
b_{\uparrow,p+1} &= I_p \otimes \text{sgn} \cdot b_{\uparrow,p}
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Luego se diagonaliza el Hamiltoniano calculado y se conservan los m autovectores para generar la matriz de cambio de base. A continuación se rotan los operadores utilizando esta matriz y se obtiene el bloque renormalizado. Luego se agrega un sitio del baño más a partir de las ecuaciones 2.12 y 2.13. Se siguen agregando sitios y renormalizando hasta conseguir el tamaño deseado.

Se elaboró un programa en lenguaje C++ para resolver este problema. El código completo se encuentra en el apéndice B. En la figura 2.3 se muestran resultados de la energía del estado fundamental del sistema en función los sitios n , agregados durante el proceso, para distintos valores de m . Se utilizó un sistema de 50 sitios.

Se observa que a partir de $m = 64$ las curvas se superponen. Además, se muestra cuánto se aparta la energía calculada de un valor de referencia en función de m . Esto se hace con el tamaño del sistema fijo en $n = 50$ y la energía de referencia se calcula utilizando $m = 256$.

Un detalle muy importante para lo que sigue es que cuando se calcula el Hamiltoniano H_L del bloque B_L en cada iteración, es necesario especificar las condiciones de contorno del bloque. Lo que se suele hacer en el NRG es despreciar las conexiones con los sitios vecinos. Esto funciona bien en la cadena de Wilson, donde los *hoppings* decrecen exponencialmente. Como se dijo anteriormente, la discretización logarítmica habla de una separación intrínseca de las escalas de energía en el problema de una

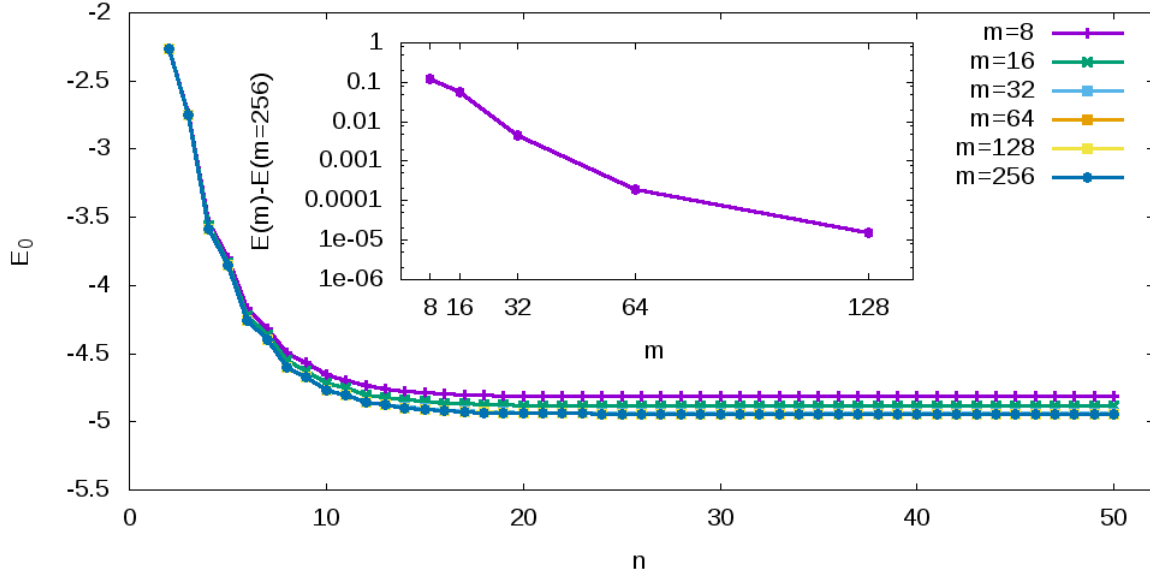


Figura 2.3: Energía del estado fundamental en función de la cantidad de sitios n agregados al sistema con el método NRG para el modelo de Anderson. Se muestran resultados para distintos valores de m . En la figura interna se observa la diferencia $E(m) - E(m = 256)$ en función de m . $E(m)$ es la energía del estado fundamental para $n = 50$. Se utiliza la escala semi logarítmica.

impureza. Cuando se quiere aplicar este método para modelos como el de Heisenberg o Hubbard, donde esta separación no existe, el NRG arroja resultados incorrectos luego de pocas iteraciones. Este tema se cubre en la próxima sección.

2.3. NRG en el espacio real

Noack y White mostraron con un argumento simple por qué el método NRG arroja resultados incorrectos en el espacio real [7]. Para esto propusieron un Hamiltoniano de tipo *tight-binding* como se muestra en la ecuación 2.14.

$$H = - \sum_{i=1}^{L-1} (|i\rangle \langle i+1| + |i+1\rangle \langle i|) + 2 \sum_{i=1}^L |i\rangle \langle i|, \quad (2.14)$$

donde el estado $|i\rangle$ es el orbital de *tight-binding* en el sitio i .

Como se dijo en la sección 2.2, el problema aparece cuando se desprecian las contribuciones del entorno al generar el Hamiltoniano H_L en cada iteración. Para ver por qué ocurre esto, debe notarse que el Hamiltoniano propuesto en 2.14 es la discretización de la energía cinética de una partícula en una caja unidimensional. Es decir, en límite de tamaño L grande, los autoestados son los correspondientes a los de la partícula en la caja. En el NRG, típicamente se desprecian las contribuciones del entorno. La consecuencia de esto en el caso planteado es que se fijan condiciones de contorno tales que la función de onda se anula en los extremos del bloque. En este caso, las autofunciones

que se obtienen para un bloque de tamaño L son $\psi_n(x) \approx \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$. Las dos primeras funciones se grafican en la figura 2.4.

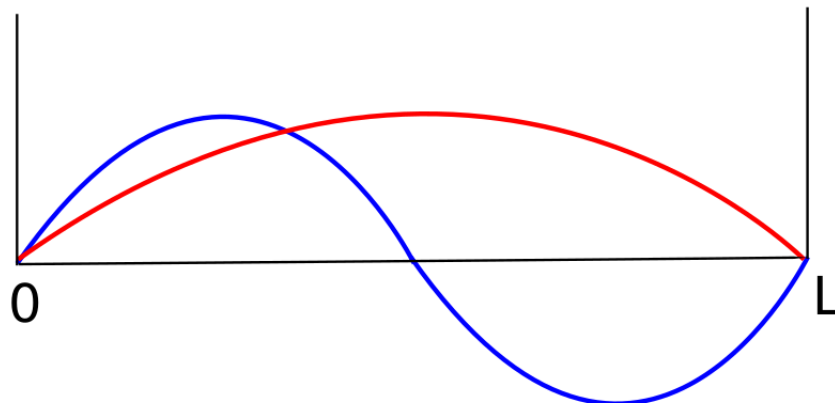


Figura 2.4: Autofunciones de una partícula en una caja unidimensional de tamaño L .

Cuando se une el bloque de tamaño L a otro del mismo tamaño, es claro ver cómo aparece el problema. No es posible generar las autofunciones del bloque de tamaño $2L$ a partir de los autoestados de baja energía de dos bloques de tamaño L . Un esquema de esto se muestra en la figura 2.5.

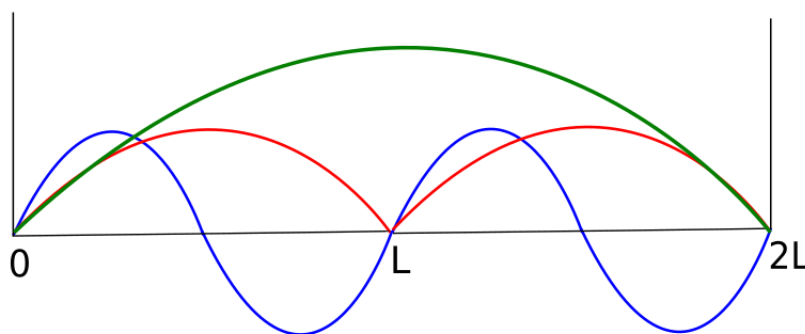


Figura 2.5: Esquema del argumento planteado por Noack y White. No es posible generar las autofunciones del bloque de tamaño $2L$ a partir de los autoestados de baja energía de dos bloques de tamaño L .

Para superar esta dificultad, Noack y White propusieron el concepto de super bloque. A partir de esto, se considera al bloque B_L como parte de un bloque más grande denominado super bloque. La idea es que al considerar el entorno, se aplican condiciones de contorno apropiadas al bloque B_L .

A continuación se explica la aplicación del concepto de super bloque a la renormalización y se introduce el concepto de proyección sobre la matriz densidad, clave para entender el DMRG.

2.4. Proyección sobre la matriz densidad.

En esta sección se introduce la terminología utilizada en el DMRG y se presentan conceptos de matriz densidad aplicados a la renormalización [5]. Para esto, se considera un sistema unidimensional, por ejemplo, puede tratarse de la cadena de espines $\frac{1}{2}$ que se analizó anteriormente. Este sistema puede dividirse en dos como se muestra en la figura 2.6.

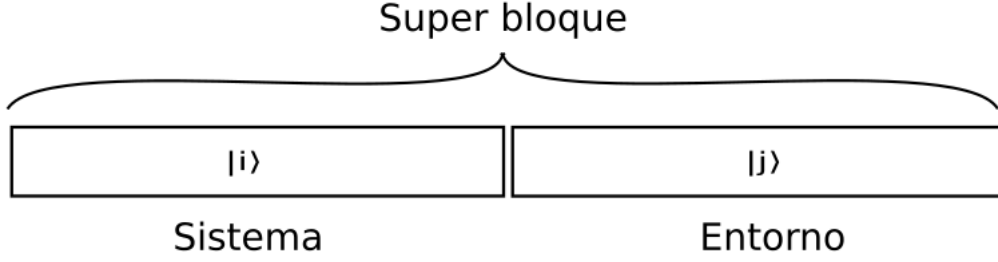


Figura 2.6: Esquema del super bloque.

Para introducir la terminología que se va a usar en el DMRG, se denomina super bloque al sistema total y sistema y entorno a las particiones del super bloque. Además, se denota como $|i\rangle$ a los estados del sistema y $|j\rangle$ a los estados del entorno. Si se sabe que el super bloque se encuentra en el estado $|\psi\rangle$, este se puede escribir como se muestra en la ecuación 2.15.

$$|\psi\rangle = \sum_i^{M_S} \sum_j^{M_E} \psi_{ij} |i\rangle |j\rangle, \quad (2.15)$$

donde el sistema y el entorno poseen M_S y M_E estados respectivamente y además se considera que $|\psi\rangle$ es un estado puro.

El objetivo es representar el estado $|\psi\rangle$ del super bloque de la forma más precisa posible, utilizando $m < M_S$ estados del sistema. Estos estados se denotan $|u^\alpha\rangle$, con $\alpha = 1, \dots, m$. La expansión más general para $|\psi\rangle$ en términos de $|u^\alpha\rangle$ se muestra en la ecuación 2.16.

$$|\hat{\psi}\rangle = \sum_{\alpha}^m \sum_j^{M_E} a_{\alpha,j} |u^\alpha\rangle |j\rangle \quad (2.16)$$

La idea es escribir este estado encontrando variacionalmente los $a_{\alpha,j}$ que minimicen la distancia con el estado $|\psi\rangle$. Este problema tiene solución en el álgebra lineal utilizando la descomposición en valores singulares.

Se puede mostrar que la distancia se minimiza si se establece que los $|u^\alpha\rangle$ sean los m autovectores asociados a los m autovalores ω_α más grandes de la matriz densidad reducida del sistema en el super bloque, la cual se define como se muestra en la ecuación 2.17, [8].

$$\rho_{ii'} = \sum_j \psi_{ij}^* \psi_{ij} \quad (2.17)$$

Una de las propiedades más importantes de la matriz densidad es la que se ve en 2.18.

$$\text{Tr } \rho = 1. \quad (2.18)$$

Esto justifica que el peso descartado al realizar la aproximación sea el que se muestra en la ecuación 2.19.

$$\xi = 1 - \sum_{\alpha}^m \omega_{\alpha} \quad (2.19)$$

Esta aproximación es buena cuando el espectro de autovalores de la matriz densidad reducida, ordenados de forma decreciente, decae rápidamente como se muestra en la figura 2.7. En la figura se observan dos situaciones. En la figura 2.7a, se observa que

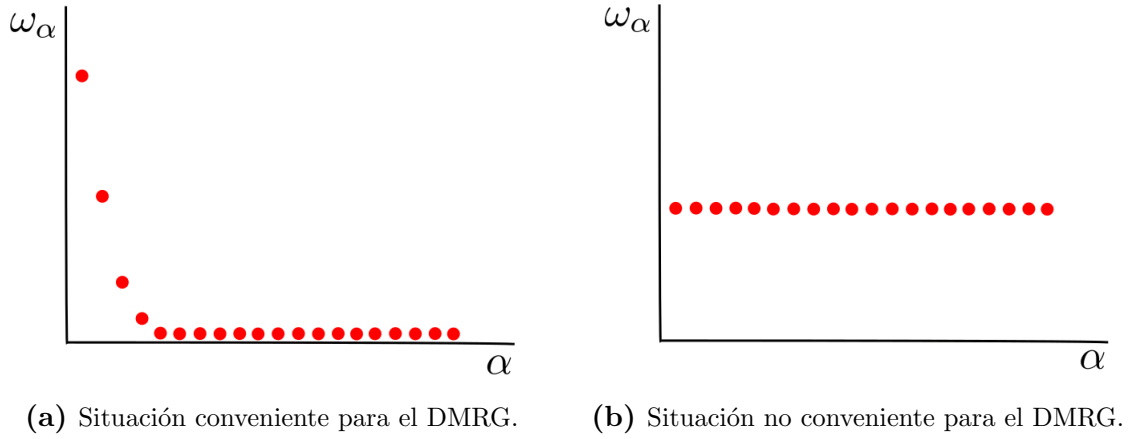


Figura 2.7: Esquema del espectro de autovalores de la matriz densidad.

el espectro de autovalores decae rápidamente, esta situación es buena para hacer la aproximación porque los autovalores cercanos a cero pueden ser descartados sin perder precisión. En la figura 2.7b, se muestra una mala situación para realizar la aproximación, pues todos los autovalores tienen el mismo peso, entonces no sería conveniente descartar estados teniendo en cuenta este criterio. Cabe destacar que esta situación se plantea a modo de ejemplo y no es una situación real.

En la próxima sección se verá cómo se aplican los conceptos de renormalización y proyección sobre la matriz densidad para dar origen al DMRG.

2.5. El grupo de renormalización con matriz densidad: DMRG

En esta sección se presenta el método DMRG. Este método se divide en dos partes, el crecimiento y los barridos [9]. Para poner un ejemplo concreto, se considerará la red unidimensional de espines $\frac{1}{2}$ vista en la sección 2.1.

2.5.1. Crecimiento

El crecimiento se realiza para alcanzar el tamaño deseado del sistema. La idea es ir agregando sitios como en el caso del NRG, pero esta vez, se agregan dos sitios en cada iteración y se renormalizan los bloques generados utilizando la proyección sobre la matriz densidad. Los pasos a seguir para el crecimiento son los siguientes:

1. El punto de partida es una red de $2k$ sitios lo suficientemente chica como para ser resuelta por diagonalización exacta. Se divide el super bloque en los bloques L y R como se muestra en la figura 2.8.



Figura 2.8: Esquema del sistema dividido en los bloques de la izquierda L y derecha R .

En cada bloque se define una base, el Hamiltoniano y los operadores que lo componen. Por ejemplo en el bloque de la izquierda se define $H_{L,k}$, $S_{L,k}^z$, $S_{L,k}^+$ y $S_{L,k}^-$. En el bloque de la derecha se definen operadores equivalentes. Cuando se trabaje con los operadores de bloque L , este será el sistema y el bloque R será entorno. Cuando se trabaje con el bloque R tendremos el caso opuesto.

2. Se agregan dos sitios como se muestra en la figura 2.9.



Figura 2.9: Esquema del sistema luego de agregar los sitios.

Se calculan los operadores del bloque de la izquierda. El Hamiltoniano $H_{L,k+1}$ se calcula con la ecuación 2.3 con $p = k$ y $q = 1$ y los operadores que lo componen $S_{L,k+1}^z$, $S_{L,k+1}^+$ y $S_{L,k+1}^-$ se calculan con la ecuación 2.4 con $p = k$. Para el bloque de la derecha, se calculan los operadores del nuevo bloque. El Hamiltoniano se calcula con la ecuación 2.3 con $p = 1$ y $q = k$ y los operadores $S_{R,k+1}^z$, $S_{R,k+1}^+$ y $S_{R,k+1}^-$ se calculan con la ecuación 2.20 con $q = k$.

$$\begin{aligned}
 S_{1+q}^z &= I_1 \otimes S_q^z \\
 S_{1+q}^+ &= I_1 \otimes S_q^+ \\
 S_{1+q}^- &= I_1 \otimes S_q^-
 \end{aligned} \tag{2.20}$$

3. A partir de los operadores calculados, se obtiene sólo el estado fundamental. Esto se puede realizar con el método de Lanczos, como se explica en el apéndice A.

4. Utilizando el estado fundamental calculado, se obtiene la matriz densidad reducida al bloque de la izquierda y se diagonaliza. Se guardan los m autoestados asociados a los m autovalores más grandes. El criterio para elegir m puede variar. Puede tratarse de un número fijo o también puede elegirse teniendo en cuenta el peso descartado definido en la ecuación 2.19.
5. Se construye una matriz cambio de base con los m autoestados y se rotan los operadores del bloque de la izquierda utilizando la ecuación 2.5. A partir de esto se obtienen las matrices $\bar{H}_{L,k+1}$, $\bar{S}_{L,k+1}^z$, $\bar{S}_{L,k+1}^+$ y $\bar{S}_{L,k+1}^-$. Se repiten los pasos 4 y 5 para el bloque de la derecha.
6. Se reemplazan los operadores del bloque L por los operadores renormalizados del bloque $L+1$ y los del R por los renormalizados del $R+1$ para empezar una nueva iteración. Se repiten los pasos 2 a 6 hasta alcanzar el tamaño N deseado.

Con esto termina el crecimiento del sistema. Luego se realizan los barridos, que se explican a continuación.

2.5.2. Barridos

Durante el crecimiento, guardamos los operadores de los bloques L y R en cada iteración. Los barridos se ejecutan con el tamaño total N del sistema fijo. La idea es ir actualizando los operadores de cada bloque y así, obtener valores más exactos de la energía del estado fundamental.

Se realizan barridos hacia la izquierda y la derecha. A continuación se explica el barrido hacia la derecha.

Luego de haber realizado el crecimiento, se forma un super bloque con el bloque L , $\frac{N}{2}$, dos sitios y el bloque R , $\frac{N}{2} - 2$ como se muestra en la figura 2.10.



Figura 2.10: Esquema del primer paso del barrido hacia la derecha.

Con esta configuración, se siguen los pasos 2 a 5 del crecimiento. Es decir, se une el bloque de la izquierda con el sitio de la izquierda y se une el sitio de la derecha con el bloque de la derecha, se calcula el estado fundamental y se renormalizan los operadores según el criterio de matriz densidad. Con esto, se calculan y almacenan los operadores de los bloques L , $\frac{N}{2} + 1$ y R , $\frac{N}{2} - 1$.

Luego se repite el procedimiento, es decir, se forma la configuración de la figura 2.11.

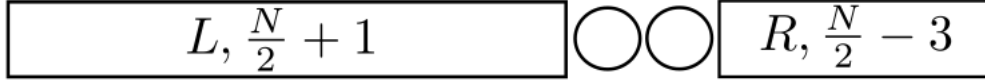


Figura 2.11: Esquema del segundo paso del barrido hacia la derecha.

Con esta nueva configuración, se calculan y almacenan los operadores de los bloques $L, \frac{N}{2}+2$ y $R, \frac{N}{2}-2$. Se repite el proceso hasta llegar a calcular y almacenar los operadores de los bloques $L, N-2$ y $R, 2$. Un esquema de esto se muestra en la figura 2.12.

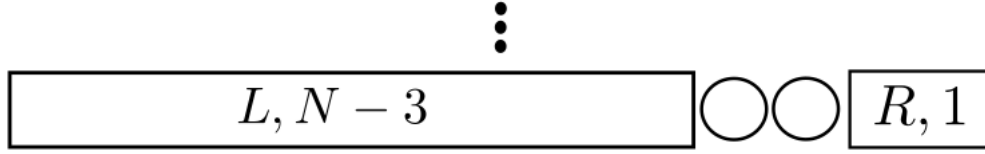


Figura 2.12: Esquema del barrido hacia la derecha.

Con esto termina el barrido hacia la derecha. Luego, se realiza el barrido hacia la izquierda de forma análoga y se repite el procedimiento hasta realizar la cantidad de barridos deseada.

Con el objetivo de ilustrar el método, se elaboró un programa en C++ para determinar la energía del estado fundamental de la cadena de espines $\frac{1}{2}$. El código se muestra en el apéndice C. Además, se desarrolló un código en lenguaje de programación en paralelo CUDA-C para comparar la ejecución de ambos programas. Esto se muestra en el mismo apéndice.

Se obtuvo la energía del estado fundamental por sitio en función del número de sitios para $J = 1$. Se incrementó el número de sitios hasta obtener $N = 200$. La renormalización se hizo almacenando los $m = 32$ estados más relevantes. El resultado se muestra en la figura 2.13.

Se realizó una regresión lineal con los resultados obtenidos. La ordenada al origen de la recta nos da una idea de la energía del estado fundamental de la red unidimensional infinita. El resultado es $E_0 = -0,443(5)$. Este resultado se corresponde con el valor calculado analíticamente por medio del ansatz de Bethe: $E_0 = -\ln(2) + \frac{1}{4}$.

Por último, en la figura 2.14 se muestra el espectro de autovalores de la matriz densidad reducida cuando el sistema tiene 200 sitios.

Se observa que la magnitud de los autovalores decrece rápidamente. Esto muestra que la aproximación realizada es buena, pues se están descartando las componentes menos relevantes del estado fundamental.

Como se dijo en el capítulo 1, la idea del presente trabajo es utilizar modelos de prueba con el objetivo de optimizar la ejecución del DMRG. Para analizar la eficiencia del método, se van a utilizar conceptos de información cuántica. En particular, es muy importante el concepto de entropía de entrelazamiento y su relación con el DMRG.

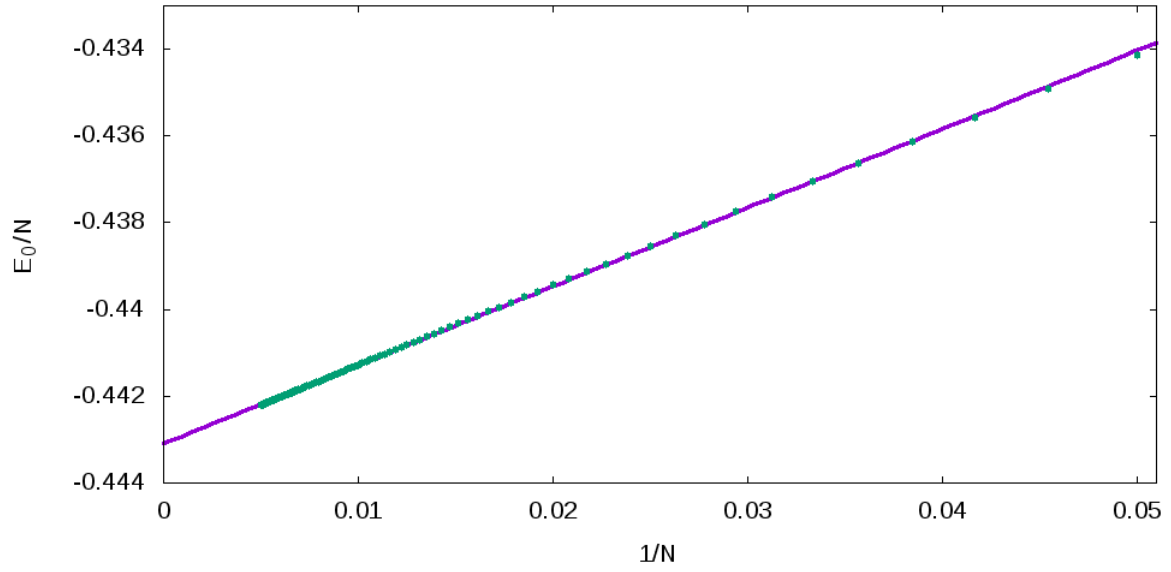


Figura 2.13: Energía por sitio del estado fundamental en función de la inversa de la cantidad de sitios para la red unidimensional de espines $\frac{1}{2}$. Se hizo una extrapolación lineal para obtener la energía de la red unidimensional infinita. El valor obtenido es $E_0 = -0,443(5)$, que se corresponde con la solución analítica $E_0 = -\ln(2) + \frac{1}{4}$.

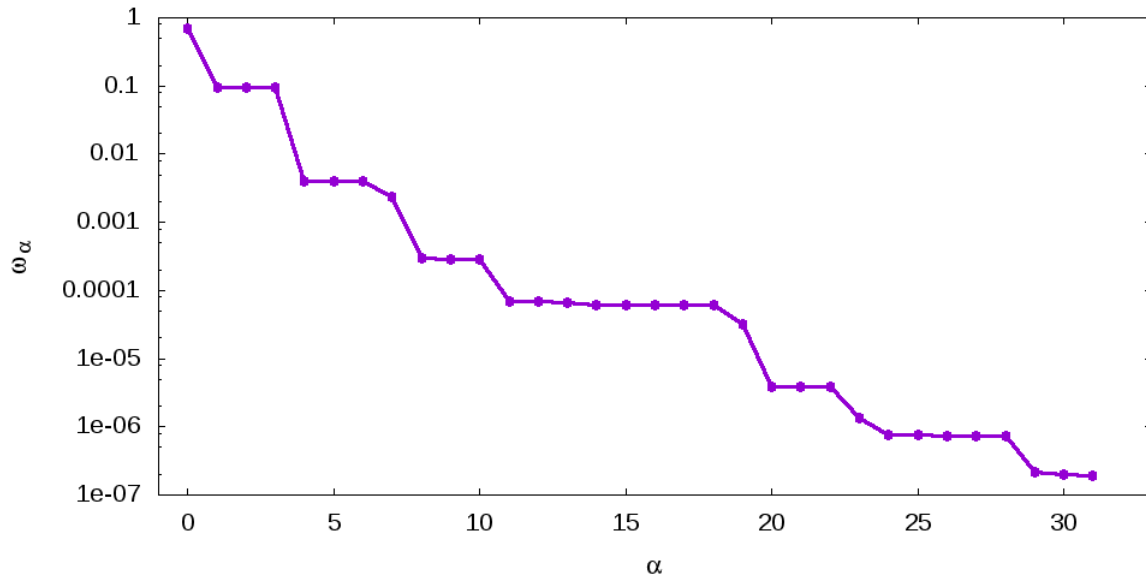


Figura 2.14: Espectro de autovalores de la matriz densidad reducida cuando la partición se hace en la mitad de la cadena con $N = 200$ para la red unidimensional de espines $\frac{1}{2}$.

Esto se explica a continuación.

2.6. DMRG y entrelazamiento.

El método DMRG induce a considerar sistemas con una partición, donde las partes son los bloques L y R . Como se vio en la sección anterior, dada una partición, se conservan sus m estados más relevantes. Si se conoce el espectro de autovalores de la

matriz densidad reducida ordenados de mayor a menor, se puede predecir fácilmente la calidad de la aproximación que se está realizando. Esta depende de qué tan rápido decrecen los autovalores.

Una cantidad que contiene información sobre los autovalores de la matriz densidad es la entropía de entrelazamiento entre el sistema y el entorno, también llamada entropía de Von Neumann [10]. Esta cantidad es la responsable de las correlaciones no clásicas en el sistema. Se calcula como se muestra en la ecuación 2.21.

$$S = - \sum_{\alpha} \omega_{\alpha} \log_2 \omega_{\alpha}, \quad (2.21)$$

donde los ω_{α} son los m autovalores de la matriz densidad reducida. La ventaja que aporta el cálculo de la entropía de entrelazamiento es que con un número, se obtiene una buena idea de la calidad de la aproximación realizada. El método DMRG será eficiente si la entropía de entrelazamiento entre las partes del sistema es pequeña.

La entropía de entrelazamiento depende de la representación que estemos utilizando para tratar el sistema. La forma que se propone en este trabajo para optimizar el método, tiene que ver con encontrar una representación en la cual se minimice la entropía de entrelazamiento de un sitio con el resto del sistema para todos los sitios. Se verá que el espacio de los Orbitales Naturales cumple con este propósito.

Se utilizó el programa mencionado en la sección anterior para calcular la entropía de entrelazamiento entre las dos mitades de la red durante el crecimiento del sistema unidimensional de espines $\frac{1}{2}$. El resultado se muestra en la figura 2.15.

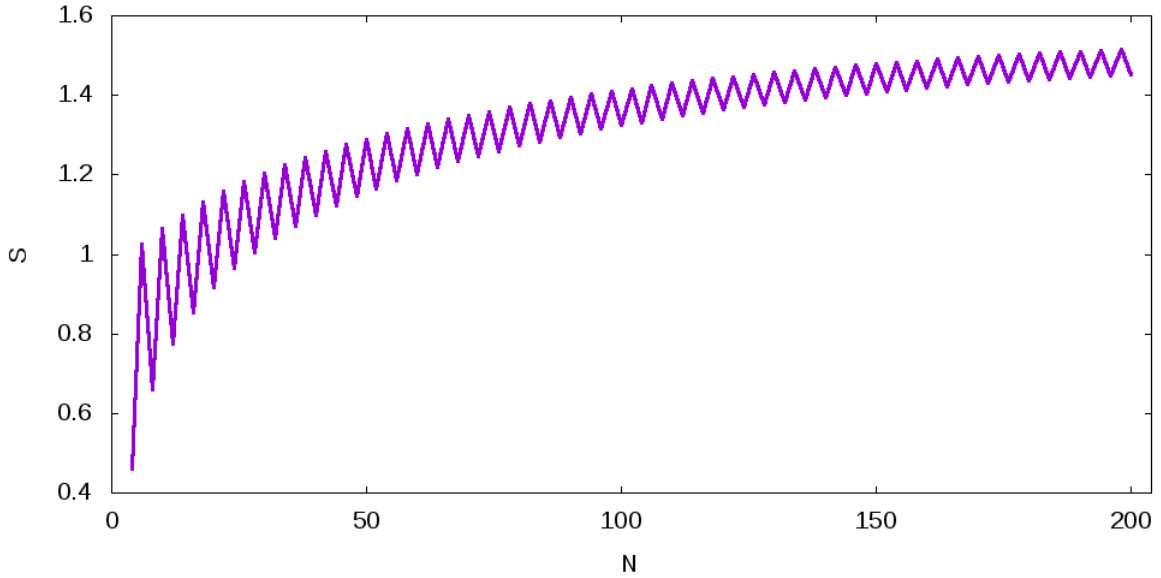


Figura 2.15: Entropía de entrelazamiento S de una mitad de la cadena con la otra en función de la cantidad de sitios n para la red unidimensional de espines $\frac{1}{2}$.

Se ve que la entropía crece con la cantidad de sitios agregados. Resulta razonable

pensar que las correlaciones aumentan si se agregan sitios al sistema. Además, se observan oscilaciones en los valores de la entropía. Cuando las mitades de la cadena son un número impar de sitios hay más entropía que si las mitades son un número par. El origen de estas oscilaciones no está claro aún. Se piensa que tiene que ver con que se introducen degeneraciones extra cuando las mitades de la cadena se componen de un número impar de sitios, pero todavía no se entiende por qué.

Un resultado interesante que se puede estudiar con estos resultados es la ley de área de la entropía. Esta dice que para estados fundamentales de Hamiltonianos de corto alcance, la entropía de entrelazamiento entre dos partes del sistema no es una magnitud extensiva, sino que es proporcional a la superficie de contacto entre las partes como se muestra en la ecuación 2.22.

$$S \propto N^{D-1}, \quad (2.22)$$

donde D es la dimensión del sistema y N es la cantidad de sitios.

En dos dimensiones, la entropía de entrelazamiento crece con la cantidad de sitios del sistema. Como se mencionó anteriormente, el DMRG es eficiente cuando el entrelazamiento entre los bloques es pequeño. Por este motivo el DMRG funciona bien para sistemas unidimensionales y no en más dimensiones.

Para el caso unidimensional, se puede demostrar que, cuando se trata de un sistema crítico, como el de Heisenberg, hay una corrección logarítmica a la ecuación 2.22. Es decir, la entropía en función de la cantidad de sitios, en una dimensión, es como se muestra en la ecuación 2.23.

$$S = \frac{c}{3} \log(N) + cte, \quad (2.23)$$

donde la constante c es la carga central, una magnitud calculada en Teoría de Campos Conformes.

Se hizo un ajuste logarítmico con los resultados obtenidos para valores de N múltiplos de cuatro. Es decir, cuando la mitad de la red tiene un número par de sitios. El resultado se muestra en la figura 2.16.

El ajuste realizado es satisfactorio en el rango de 4 a 40 sitios. En el rango de 40 a 200 sitios, los resultados se apartan del comportamiento logarítmico. Esto se debe a que, cuando se incrementa el número de sitios, se descartan más estados y se pierde precisión en el cálculo. Utilizando la ecuación 2.23, se obtiene que la carga central es $c = 0,89(1)$. Este resultado se acerca al valor de $c = 1$ calculado para el modelo de Heisenberg unidimensional [11].

En este capítulo, se presentó el método DMRG. Y se aplicó al modelo de Heisenberg unidimensional. Además, se introdujo el concepto de entropía de entrelazamiento entre las partes del sistema y se vio que es un indicador de la eficiencia del método.

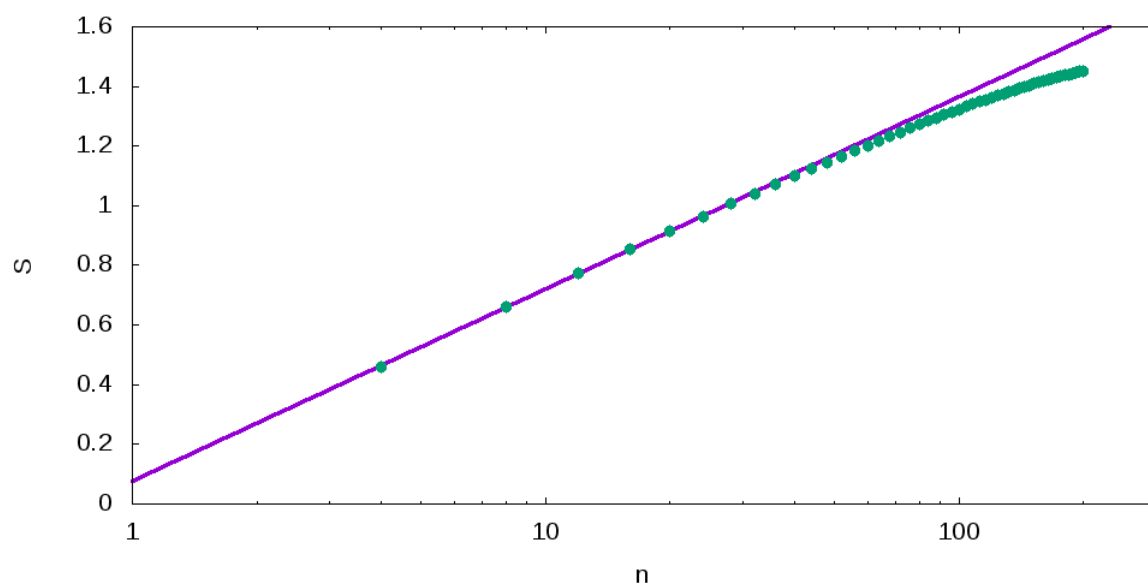


Figura 2.16: Entropía de entrelazamiento en la mitad de la cadena en función de la cantidad de sitios para la red unidimensional de espines $\frac{1}{2}$. Para realizar el ajuste logarítmico, se toman los datos con N múltiplo de 4. El resultado del ajuste arroja un valor de la carga central $c = 0,89(1)$.

En el próximo capítulo se explican los cambios de representación de los sistemas de muchas partículas. En particular, se estudia el espacio de los Orbitales Naturales. En esta representación, se minimiza la entropía de sitio para todos los sitios. La entropía de sitio es la entropía de entrelazamiento de un sitio con el resto del sistema. Como disminuye el entrelazamiento, esta representación es una buena candidata para incrementar la eficiencia del DMRG.

Capítulo 3

Representaciones de los sistemas de muchas partículas

En este capítulo se estudian los cambios de representación de los sistemas de muchas partículas. Como se dijo en el capítulo 1, la idea de este trabajo es evaluar la ejecución del DMRG en el espacio de los Orbitales Naturales para incrementar la eficiencia del método.

Se verá que el espacio de los Orbitales Naturales es el que minimiza la entropía de sitio con el resto del sistema para todos los sitios. Esta configuración reduce el entrelazamiento y por eso es una buena candidata para la optimización del DMRG.

Primero se introduce el sistema *spinless* con *hopping* y potencial a primeros vecinos que se va a utilizar para ejemplificar los cambios de representación, luego se presenta el espacio de Fourier y a continuación el de los Orbitales Naturales. Por último, se analiza el comportamiento de la entropía de entrelazamiento en el espacio real y las dos representaciones mencionadas. Con esto se tratará de entender bajo qué condiciones es conveniente realizar un cambio de representación para incrementar la eficiencia del DMRG.

3.1. Sistema de partículas sin espín en una red unidimensional

Para ejemplificar las ideas vertidas en este capítulo, se utiliza un sistema *spinless* unidimensional con *hopping* y potencial a primeros vecinos. El Hamiltoniano que describe este sistema es el que se muestra en la ecuación 3.1.

$$H = -t \sum_i \left(c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i \right) + V \sum_i c_{i+1}^\dagger c_{i+1} c_i^\dagger c_i, \quad (3.1)$$

donde i es el índice de sitio, c^\dagger y c son los operadores de creación y destrucción de partículas, t es el término de *hopping* y V el de potencial con el que interactúan las partículas. Se ve que las interacciones son a primeros vecinos.

Cabe destacar que el Hamiltoniano de Heisenberg visto en el capítulo anterior se puede transformar en un sistema de este tipo. La manera de realizar esto es escribiendo los operadores involucrados en el Hamiltoniano 2.1 como se muestra en la ecuación 3.2.

$$\begin{aligned} S_j^+ &= c_j^\dagger \exp \left(i\pi \sum_{j < k} c_k^\dagger c_k \right) \\ S_j^- &= \exp \left(-i\pi \sum_{j < k} c_k^\dagger c_k \right) c_j \\ S_j^z &= c_j^\dagger c_j - \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (3.2)$$

A este cambio de representación se lo conoce como transformación de Jordan-Wigner. A continuación se presenta el espacio de Fourier, llamado también espacio recíproco o espacio de momento.

3.2. Espacio de Fourier

El cambio de representación del espacio real al de Fourier, se realiza transformando los operadores involucrados en el Hamiltoniano 3.1 mediante la transformada de Fourier como se muestra en la ecuación 3.3.

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikn} c_k \quad (3.3)$$

Aplicando condiciones periódicas de contorno, se obtiene el Hamiltoniano en la representación del espacio de Fourier, como se muestra en la ecuación 3.4.

$$H = -2t \sum_k \cos(k) c_k^\dagger c_k + \frac{V}{N} \sum_{kpq} e^{-i(k-p)} c_k^\dagger c_p c_q^\dagger c_{k-p+q} \quad (3.4)$$

En principio, el DMRG se puede aplicar directamente en este espacio, pero como las interacciones en esta representación son no diagonales, una implementación real resulta imposible. Xiang propuso un método para implementar el DMRG al espacio de Fourier en 1996 [12]. Aplicó este método al modelo de Hubbard en una y dos dimensiones y vio que la convergencia del método dependía fuertemente del valor del potencial repulsivo de Coulomb U . El método es exacto para $U = 0$, ya que el Hamiltoniano es diagonal, pero la convergencia empeora rápidamente con el incremento de U . Además, comparó los métodos en el espacio de momento y el espacio real en una dimensión y vio que el error en la determinación del estado fundamental era mayor en el espacio de momento.

Otro estudio realizado por Xiang fue la comparación de la ejecución en el espacio de momento en una y dos dimensiones y vio que el método es más eficiente en una red de 4×4 que en una red unidimensional de 16 sitios. Este resultado induce a considerar que el método propuesto por Xiang es una buena propuesta para generalizar el DMRG a más de una dimensión.

A continuación se presenta el espacio de los Orbitales Naturales que va a ser fundamental para este trabajo.

3.3. Espacio de los Orbitales Naturales

La representación estudiada en esta sección es la de los Orbitales Naturales. Esta es muy utilizada en química cuántica y va a ser objeto de nuestro estudio de sistemas de una impureza con el DMRG [13].

La idea es representar el conjunto de operadores c_i del espacio real en otro espacio. En este, el nuevo conjunto de operadores se escribe d_i . A los nuevos sitios generados se los denomina orbitales. La transformación se realiza a través de la matriz unitaria U . Entonces, el cambio de representación se escribe como se muestra en la ecuación 3.5.

$$\begin{aligned} d_i^\dagger &= \sum_a c_a^\dagger U_{ai}^* \\ d_i &= \sum_a c_a U_{ai}, \end{aligned} \tag{3.5}$$

El objetivo de la nueva representación es minimizar la entropía de entrelazamiento del orbital ν con el resto de la red para todos los orbitales. Dicha entropía, que se denomina por simplicidad, entropía de sitio, se define como se muestra en la ecuación 3.6.

$$s_\nu = -n_\nu \log(n_\nu) - (1 - n_\nu) \log(1 - n_\nu), \tag{3.6}$$

donde n_ν es la ocupación del orbital ν .

En lo que sigue, se supone que el sistema se encuentra en un estado $|\psi\rangle$. En el nuevo espacio, el número de ocupación del orbital ν se escribe como se muestra en la ecuación 3.7.

$$\begin{aligned}
\langle n_\nu \rangle &= \langle \psi | d_\nu^\dagger d_\nu | \psi \rangle \\
&= \sum_{ij} \langle \psi | c_i^\dagger U_{i\nu}^* c_j U_{j\nu} | \psi \rangle \\
&= \sum_{ij} U_{i\nu}^* \langle \psi | c_i^\dagger c_j | \psi \rangle U_{j\nu} \\
&= \sum_{ij} U_{i\nu}^* D_{ij} U_{j\nu},
\end{aligned} \tag{3.7}$$

donde, se utilizó la definición de matriz densidad de un sitio que se muestra en la ecuación 3.8.

$$D_{ij} = \langle \psi | c_i^\dagger c_j | \psi \rangle. \tag{3.8}$$

Para encontrar la matriz de rotación U que realiza la transformación, se busca minimizar los números de ocupación en el nuevo espacio [14]. Para esto se utiliza el método de los multiplicadores de Lagrange minimizando los $\langle n_\nu \rangle$ que se muestran en la ecuación 3.7 con la restricción $\sum_j U_{j\nu}^* U_{j\nu} = 1$, utilizando λ_ν como multiplicador de Lagrange. La minimización se realiza respecto de los elementos de matriz $U_{k\nu}^*$ como se muestra en la ecuación 3.9.

$$\frac{\partial}{\partial U_{k\nu}^*} \left(n_\nu - \lambda_{\nu} \left(\sum_j U_{j\nu}^* U_{j\nu} - 1 \right) \right) = 0. \tag{3.9}$$

Con esto se obtiene que, para minimizar los números de ocupación en la nueva representación, la matriz U debe cumplir con la siguiente ecuación

$$DU = \lambda U, \tag{3.10}$$

donde D es una matriz tal que su elemento i, j es D_{ij} . Entonces, se ve que para hallar la matriz U , se debe resolver un problema de autovalores. La matriz U se construye ubicando los autovectores de la matriz D en columna.

Con este procedimiento, se consigue una representación en la que los orbitales generados poseen la mínima entropía de entrelazamiento con el resto de la red.

Para ver cómo se transforma el Hamiltoniano del sistema ante este cambio de representación, se plantea un Hamiltoniano más general que el visto en 3.1. Se trata de un Hamiltoniano con interacciones que pueden ser de largo alcance. Esto se muestra en la ecuación 3.11.

$$H = \sum_{ij} \left(t_{ij} c_i^\dagger c_j + h.c. \right) + \sum_{ij} V_{ij} c_i^\dagger c_i c_j^\dagger c_j. \tag{3.11}$$

El Hamiltoniano en el espacio de los Orbitales Naturales, resulta ser el de la ecuación

3.12.

$$H = \sum_{ij} \left(\bar{t}_{ij} d_i^\dagger d_j + h.c. \right) + \sum_{ij} \bar{V}_{ijkl} d_i^\dagger d_j d_k^\dagger d_l. \quad (3.12)$$

Los elementos de *hopping* y potencial se calculan como se ve a continuación

$$\begin{aligned} \bar{t}_{ij} &= \sum_{kl} U_{ki}^* t_{kl} U_{lj} \\ \bar{V}_{ijkl} &= \sum_{mn} (U_{ni} U_{mj} - U_{nj} U_{mi}) \cdot (U_{mk} U_{nl} - U_{ml} U_{nk}) \cdot V_{mn} \end{aligned} \quad (3.13)$$

A partir de esto, se ve que la cantidad de términos generados en el Hamiltoniano es mayor que la del espacio original. De todas maneras, el espacio de los Orbitales Naturales es un buen candidato para disminuir el entrelazamiento y así incrementar la eficiencia del DMRG.

Para ver el comportamiento de la entropía bajo los cambios de representación expuestos, se toma como modelo el sistema *spinless* con interacción a primeros vecinos en una dimensión. Este es el tema de la próxima sección.

3.4. Estudio de los cambios de representación del sistema *spinless* con interacción a primeros vecinos

Para analizar el comportamiento de la entropía debido a los cambios de representación, se estudia el sistema *spinless* con interacción a primeros vecinos. Se utilizó un programa que calcula el estado fundamental por diagonalización exacta y la entropía de entrelazamiento entre dos partes de este sistema.

Primero se estudió un sistema de 13 sitios y 7 partículas con condiciones de contorno abiertas. Se utilizó un valor de $t = 1$ para los términos de *hopping* y el potencial V se fue variando en el rango de 0 a 10. En estas condiciones se mide la entropía en función del potencial. La partición se hace de tal manera que queden 6 sitios a la izquierda y 7 a la derecha. En la figura 3.1 se muestra el resultado.

Se observa que la entropía de entrelazamiento depende de la representación utilizada. En el espacio de Fourier, la entropía crece con el potencial de interacción. Esto se debe a que, para potenciales grandes, las partículas tienden a quedar localizadas en el espacio real. Si se da esta situación, las partículas tienden a estar completamente deslocalizadas en el espacio de Fourier. Esto aumenta el entrelazamiento.

En el espacio real, se observa que la entropía decrece con el potencial aplicado. Esto

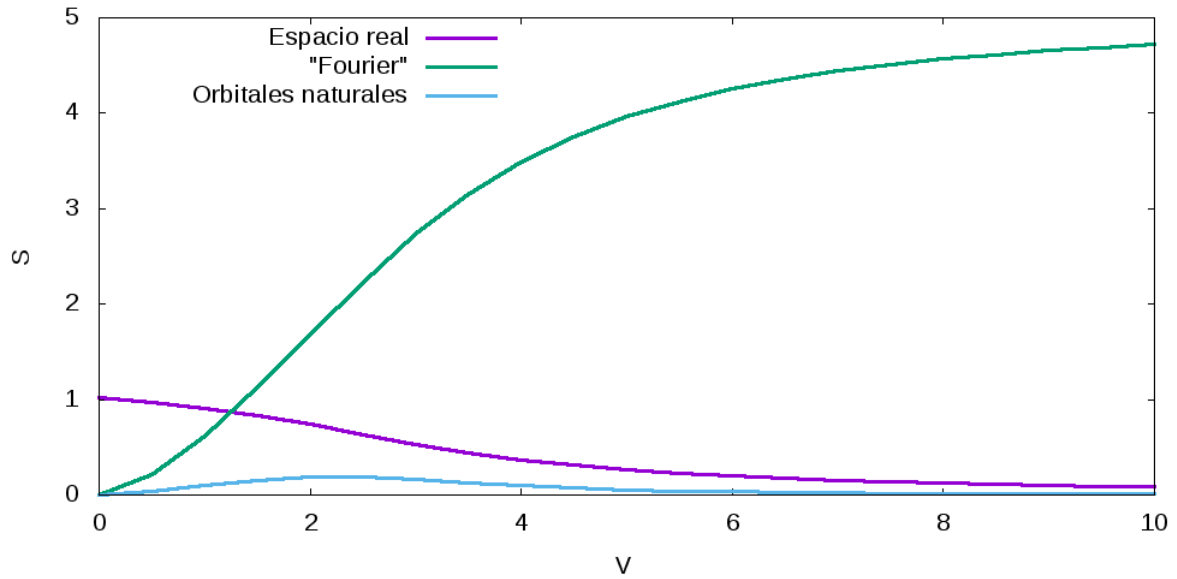


Figura 3.1: Entropía de entrelazamiento en función del potencial V para un sistema de 7 partículas sin espín en 13 sitios con condiciones de contorno abiertas.

quiere decir que el estado fundamental se puede escribir como producto de un estado del bloque de la izquierda y otro del bloque de la derecha.

Por último, se ve que en el caso de los Orbitales Naturales, la entropía es menor en todo el rango explorado. Esto quiere decir que esta es una buena situación para utilizar Orbitales Naturales en la ejecución del DMRG.

A continuación, se estudió un sistema de 14 sitios y 7 partículas con condiciones de contorno abiertas. Se establecieron los terminos de *hopping* con $t = 1$ y la partición se hizo en la mitad de la red. Los resultados se ven en la figura 3.2.

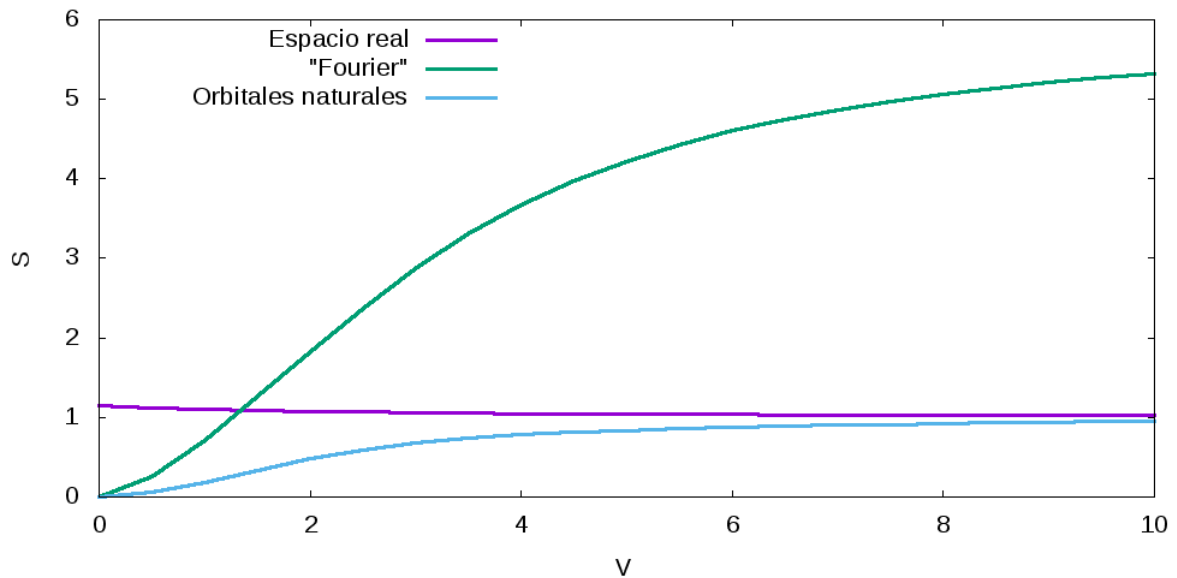


Figura 3.2: Entropía de entrelazamiento en función del potencial V para un sistema de 7 partículas sin espín en 14 sitios con condiciones de contorno abiertas.

En este caso se ve que, como en el caso anterior, la entropía en el espacio de Fourier crece con el potencial de interacción V . En el caso de los Orbitales Naturales, la entropía no supera a la del espacio real en todo el rango evaluado. Esta situación también es buena para el uso de los Orbitales Naturales en el DMRG.

Por último, se impusieron condiciones periódicas sobre el sistema de 14 sitios. Los resultados se muestran en la figura 3.3.

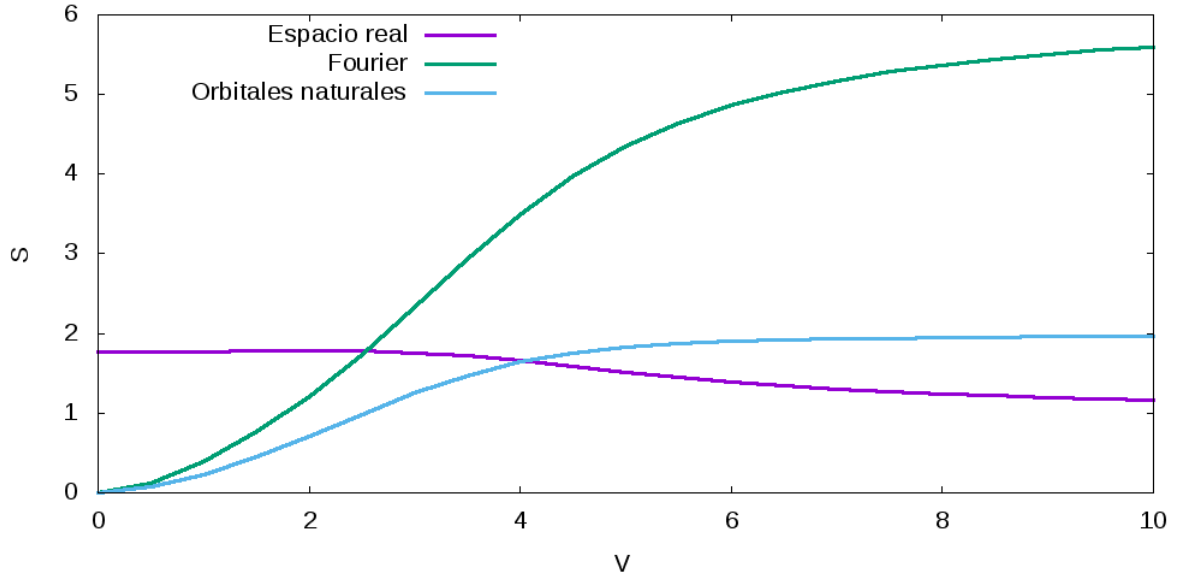


Figura 3.3: Entropía de entrelazamiento en función del potencial V para un sistema de 7 partículas sin espín en 14 sitios con condiciones de contorno periódicas.

En el espacio de Fourier se observa lo mismo que en las dos situaciones anteriores. En este caso, la representación de los Orbitales Naturales no reduce la entropía para $V > 4$. Se ve que, si bien este espacio reduce la entropía de sitio, en esta situación, no logra reducir la entropía entre las dos mitades de la red. En este caso, no sería conveniente realizar la rotación a Orbitales Naturales para utilizar el DMRG.

En este capítulo se presentó la representación de los Orbitales Naturales y se justificó por qué es el espacio en el que se minimiza la entropía de sitio en la red. Esto la convierte en una buena candidata para la optimización del DMRG, pues se vio que este método es más eficiente cuando la entropía de entrelazamiento entre los bloques es chica. Se comprobó mediante ejemplos concretos que la entropía de entrelazamiento depende de la representación utilizada y se mostraron casos en los que el cambio de espacio al de los Orbitales Naturales resulta conveniente.

En el próximo capítulo, se estudia la eficiencia del DMRG para el cálculo del estado fundamental del modelo de Anderson en una dimensión. Se realiza la comparación entre el espacio original y el de los Orbitales Naturales.

Capítulo 4

Optimización del DMRG en el estado fundamental del modelo de Anderson

En este capítulo se evalúa la conveniencia de utilizar la representación Orbitales Naturales en el modelo de una impureza de Anderson unidimensional. Para esto se compara la ejecución de un programa que resuelve este modelo para distintas configuraciones.

El modelo de Anderson es un modelo de una impureza. Como se dijo en el capítulo 2, este tipo de modelos se componen de dos sistemas cuánticos. El primero consta de pocos grados de libertad y se llama impureza. El segundo es un sistema de muchos grados de libertad acoplados a la impureza y se llama baño o entorno.

El estudio de este tipo de problemas se inició en los años 1960s y 70s a cargo de Anderson, Kondo y Wilson, entre otros. Originalmente se estudió la física de una impureza magnética presente en un metal. Esta línea de investigación permitió estudiar el mecanismo teórico del efecto Kondo, observado experimentalmente muchos años antes. Además, impulsó el desarrollo del método NRG mencionado en el capítulo 2.

Entre sus aplicaciones más recientes se encuentra el método campo medio dinámico, DMFT por sus siglas en inglés, utilizado para calcular la estructura electrónica de modelos fuertemente correlacionados. En su versión más simple, este método mapea la red original a un sistema de una impureza en el cual, el baño debe ser determinado de forma autoconsistente hasta lograr la convergencia de la función de Green y alcanzar la autoenergía local. Por este motivo, la eficiencia del DMFT radica en la posibilidad de resolver de manera óptima problemas de una impureza.

Las dificultades de estudiar este tipo de sistemas residen en la gran cantidad de grados de libertad del baño, convirtiéndolo en un problema a tratar para el DMRG. En este capítulo se toma el modelo de una impureza de Anderson y se estudian las

propiedades del estado fundamental planteando distintas configuraciones. Se utilizan las configuraciones Cadena Uniforme, Estrella y Cadena de Wilson. A partir de estas configuraciones se estudia la eficiencia del DMRG realizando la rotación al espacio de los Orbitales Naturales y también ordenando los orbitales de acuerdo a distintos criterios. Además, se compara la eficiencia de resolver este tipo de problemas con el método NRG.

4.1. Problema de una impureza de Anderson

En esta sección, se presenta el modelo de Anderson de una impureza, SIAM por sus siglas en inglés. El Hamiltoniano que describe este modelo es el que se muestran en la ecuación 4.1.

$$\begin{aligned}
 H &= H_{imp} + H_{bath} + H_{imp-bath} \\
 H_{imp} &= \sum_{\sigma} \epsilon_f f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + U f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\downarrow} \\
 H_{bath} &= \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \\
 H_{imp-bath} &= \sum_{k\sigma} V_k \left(f_{\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \right)
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Se ve que el Hamiltoniano se compone de tres términos. H_{imp} es el término propio de la impureza, H_{bath} es el término que describe el baño y $H_{imp-bath}$ es el que tiene en cuenta la interacción entre baño e impureza. El operador f^{\dagger} es el operador fermiónico de creación para los sitios de la impureza y f es el de destrucción. Análogamente, para los sitios del baño se tiene c^{\dagger} y c . ϵ_f es la magnitud de la energía propia de los sitios de la impureza y ϵ_k la de los sitios del baño. U es la magnitud de la interacción en la impureza. Por último, V_k es la magnitud del acoplamiento entre los sitios de la impureza y el baño.

En lo que sigue, se estudian sistemas de una impureza de Anderson unidimensionales. En particular se analizan tres configuraciones: Cadena Uniforme, Estrella y Cadena de Wilson. Estas configuraciones difieren en la forma en la que los sitios del baño interactúan entre sí y con la impureza.

4.2. Configuración Cadena Uniforme

La primera configuración a estudiar es la llamada Cadena Uniforme. El Hamiltoniano que la describe se muestra en la ecuación 2.6[6].

$$\begin{aligned}
H &= H_{imp} + H_{pot} + H_{kin} \\
H_{imp} &= U \left(n_{0,\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{0,\downarrow} - \frac{1}{2} \right) \\
H_{pot} &= \sum_{l=1}^L \sum_{\sigma} \epsilon_l c_{l,\sigma}^{\dagger} c_{l,\sigma} \\
H_{kin} &= \sum_{l=0}^L \sum_{\sigma} \left(t c_{l+1,\sigma}^{\dagger} c_{l,\sigma} + h.c. \right)
\end{aligned} \tag{4.2}$$

Se trata de un sistema unidimensional donde l es el índice de sitio. La impureza se ubica en la posición $l = 0$ y los sitios poseen interacción a primeros vecinos a través de un término de hopping constante t . Una representación gráfica de esta configuración se muestra en la figura 4.1.

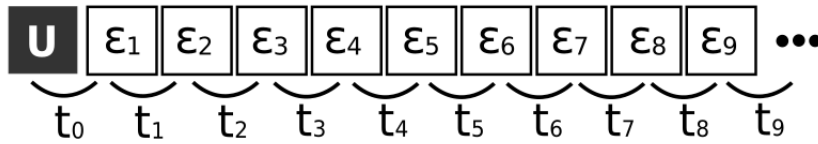


Figura 4.1: Esquema de la configuración cadena.

Además, se consideró un sistema separado por espín. Esto quiere decir que las partículas con espín para abajo se ubican del lado izquierdo de la cadena y las partículas con espín para arriba, del derecho. Una representación gráfica de esto se muestra en la figura 4.2.

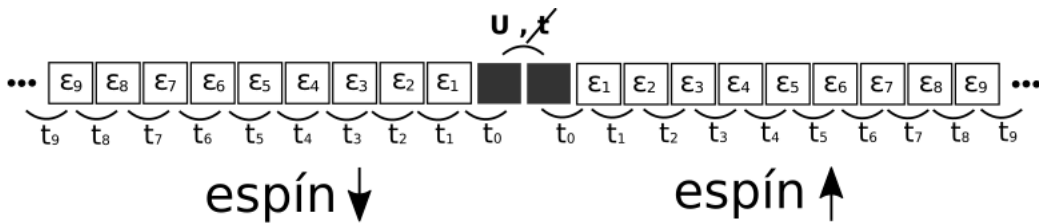


Figura 4.2: Esquema de la configuración cadena separada por espín.

Se observa que los sitios de la impureza interactúan a través de un potencial U , pero no hay hopping entre ellos. Esto asegura que las partículas de la mitad izquierda no van a pasar a la mitad derecha de la red y viceversa, es decir, asegura la separación en espín.

Se utilizó el método DMRG para obtener la energía del estado fundamental de esta configuración. El programa recibe como entrada los valores de t , U y ϵ_l del Hamiltoniano especificado en 2.6. Se utilizó el criterio de peso descartado, definido en 2.19, para

descartar estados en la renormalización. Se consideró que el peso descartado debía ser menor que 10^{-10} .

El primer caso que se estudia es el de una red de 100 sitios separada en espín. Es decir, se puede pensar que en la mitad izquierda de la cadena tenemos 50 sitios con espín para abajo y en la mitad derecha tenemos 50 sitios con espín para arriba. En cada una de las mitades, un sitio corresponde a la impureza y los 49 restantes al baño. Los parámetros utilizados en este primer caso son: $t = -1$, $\epsilon_l = 0$ y $U = 1$. Luego de haber realizado el crecimiento, se realizaron cuatro barridos. En el último barrido, se calculó la entropía de entrelazamiento y la cantidad de estados m conservados en cada partición. Los resultados se muestran en la figura 4.3.

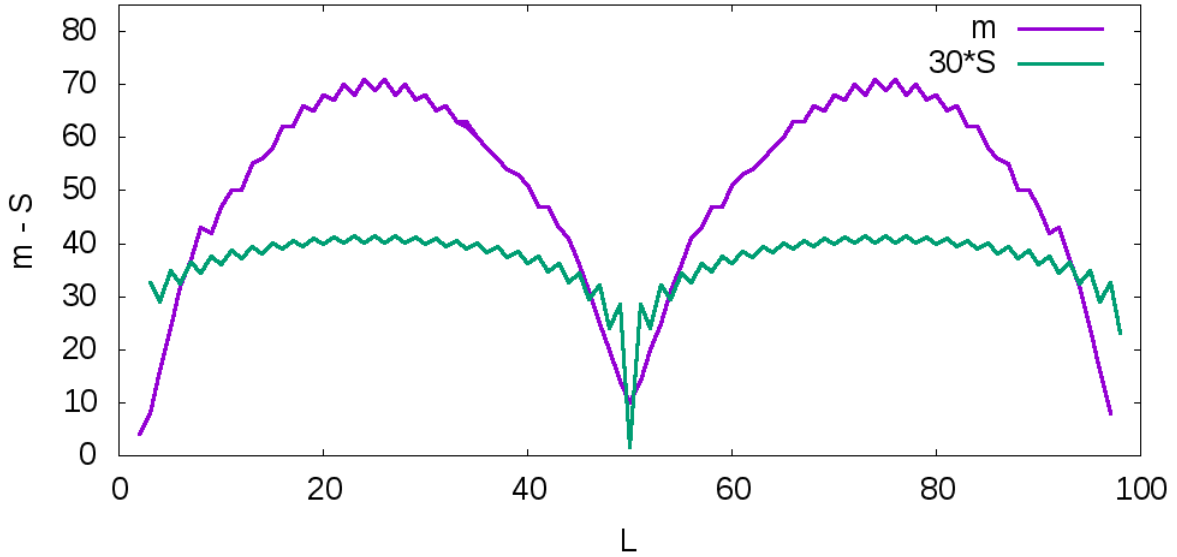


Figura 4.3: Resultados de la ejecución del DMRG para el SIAM con la configuración Cadena. La entropía se muestra multiplicada por un factor 30 para que pueda ser apreciada en el gráfico.

Se ve que la entropía de entrelazamiento en función de la partición realizada presenta las mismas oscilaciones que se vieron en el caso de la cadena de espines $\frac{1}{2}$. Además, se ve que, cuando se realiza la partición en el centro de la red, la entropía de entrelazamiento es mínima. Esto es un indicador de la separación de espín que presenta el sistema. Además, se observa que el gráfico es simétrico respecto de la mitad de la cadena. Esto resulta razonable, pues ambos tipos de espín deberían ser equivalentes.

Analizando el gráfico de m en función de la partición realizada, se puede decir que es un resultado que habla de la eficiencia del método, pues nos indica el costo computacional de cada paso.

Se puede notar que este gráfico presenta una forma similar al de la entropía de entrelazamiento. Esto da una idea de la entropía de entrelazamiento como medida del costo computacional, como se mencionó en el capítulo 2.

Además, en la figura 4.4, se muestra el espectro de autovalores de la matriz densidad

para dos particiones distintas.

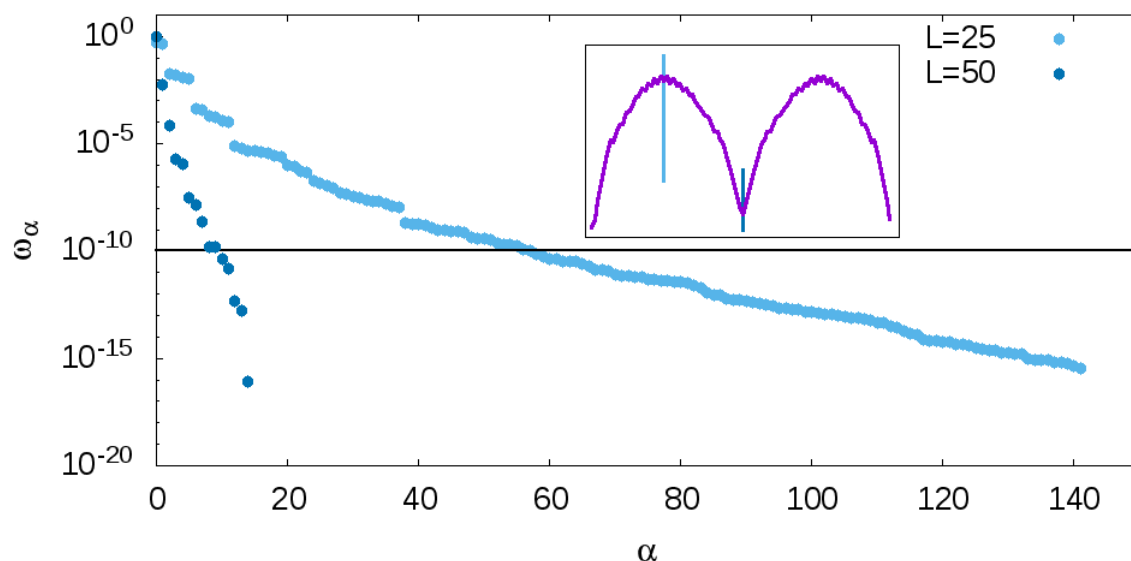


Figura 4.4: Espectro de autovalores de la matriz densidad para dos particiones distintas: una en la mitad de la cadena y la otra en $\frac{1}{4}$ de la misma. La línea negra indica que por debajo de esta, los estados asociados a estos autovalores se descartan.

Se ve que cuando la partición se realiza en la mitad de la cadena, el espectro de autovalores de la matriz densidad decae rápidamente. Como se mencionó en el capítulo 2, se trata de una buena situación para el DMRG, pues es posible almacenar pocos estados sin perder precisión. En cambio, cuando la partición se realiza en $\frac{1}{4}$ de la cadena, se ve que el espectro de autovalores decae más lentamente. Esta es una situación desfavorable, porque es necesario conservar muchos estados para no perder precisión.

4.3. Configuración Cadena Uniforme: Orbitales Naturales

Con el objetivo de reducir el costo computacional en el sistema que acabamos de estudiar, se realizan transformaciones al espacio de los Orbitales Naturales. Utilizando el estado fundamental obtenido a partir de la configuración Cadena de la sección anterior, se obtienen las matrices de rotación que se van a utilizar. Estas son introducidas como entradas del programa.

Se realizaron dos rotaciones. Para ambos casos se mantuvo la separación en espín. Es decir, se hizo una rotación para cada mitad de la red. Las rotaciones se hicieron manteniendo la localidad de la impureza. Esto se hizo de esta manera pues en el estudio la dinámica, que se realiza en el capítulo 5, es necesario aplicar operadores de creación

y destrucción en el sitio de la impureza. Si en la rotación, la impureza se mezcla con los sitios del baño, esto no sería posible.

El procedimiento para obtener la matriz de rotación al espacio de los Orbitales Naturales es el siguiente: para cada mitad de la cadena, primero se calcula la matriz densidad de sitio D_{ij} . Para mantener la localidad de la impureza, los elementos D_{ij} , donde i es el sitio de la impureza y j es un sitio del baño, se fijan en cero. Se denota D_{izq} a la matriz densidad de sitio del lado izquierdo de la red y D_{der} a a del lado derecho. En la figura se muestra un esquema de las matrices generadas en cada mitad de la red. En este punto vale la pena recordar que en la red original, las impurezas están ubicadas en el centro de la red.

A continuación se construyen la matrices de rotación local. Primero se explica el caso de la rotación $ON(n_i)$. Para la mitad izquierda, se toma la matriz D_{izq} y se diagonaliza. Los autovalores de esta matriz son los números de ocupación de los orbitales. Los autovectores tienen un autovalor asociado. La matriz de rotación local se obtiene ubicando los autovectores de la matriz D_{izq} como columna. El orden en el que se ubican estas columnas es en orden creciente de sus autovalores asociados. Para la mitad derecha se realiza el mismo proceso utilizando la matriz D_{der} . A partir de ahora, a este tipo de rotación se la denomina Orbitales Naturales ordenados por ocupación.

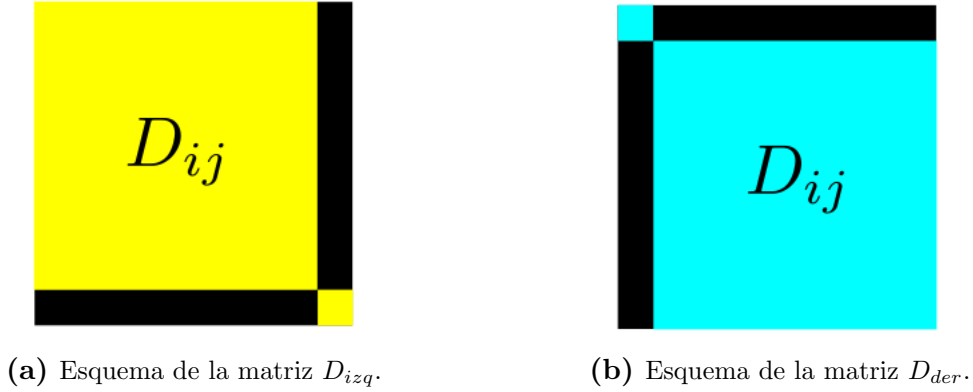


Figura 4.5: Esquema de las matrices de densidad de sitio locales. Los bloques negros representan bloques de ceros.

Ahora se explica el caso de la rotación $ON(s_i)$. Para la mitad izquierda, se toma la matriz D_{izq} y se diagonaliza. A cada uno de sus autovalores, se le asocia una entropía de sitio por medio de la ecuación 3.6. Es decir, a los autovectores se les asigna una entropía de sitio asociada. La matriz de rotación local se arma ubicando los autovectores de D_{izq} como columnas en el orden creciente de sus entropías de sitio asociadas. La mitad derecha se obtiene de manera similar, pero ordenando los autovectores de D_{der} en orden decreciente de la entropía de sitio asociada. Esto se hace así manera porque la rotación $ON(s_i)$ utiliza el criterio de concentrar la entropía de sitio en el centro de la cadena. A esta rotación se la denomina Orbitales Naturales ordenados por entropía de sitio.

Por último, se construye la matriz de rotación del sistema ubicando las matrices de rotación local como se muestra en la figura.

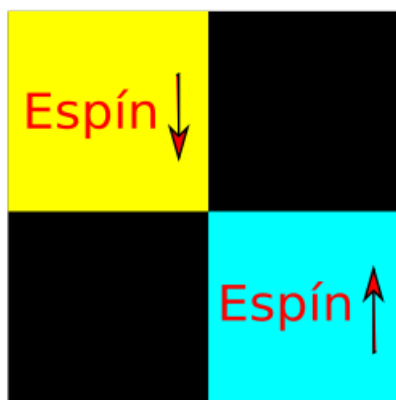


Figura 4.6: Esquema de la matriz de rotación al espacio de los Orbitales Naturales. Los bloques negros representan bloques de ceros.

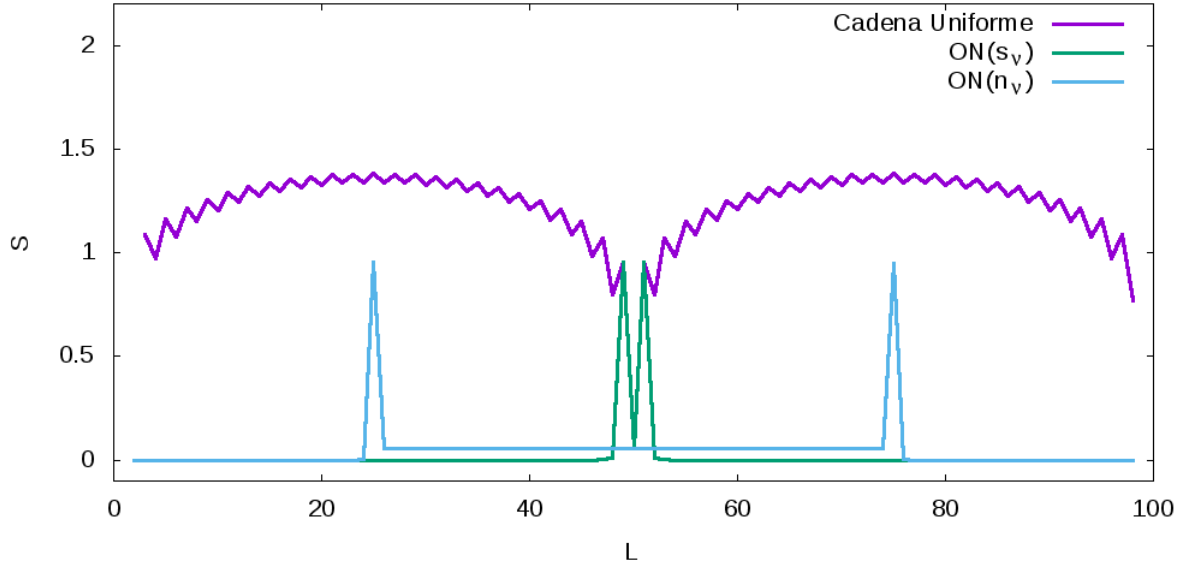
Se ejecutó el programa con estas rotaciones. Se utilizó el criterio de peso descartado menor que 10^{-10} para la renormalización y se realizaron cuatro barridos después del crecimiento. En el último barrido, se calculó la entropía de entrelazamiento en función de la partición realizada. Los resultados se muestran en la figura 4.7.

En la figura 4.7a se observa que la entropía de entrelazamiento disminuye para todas las particiones cuando se utilizan las rotaciones al espacio de los Orbitales Naturales. Además, se observa que para las tres configuraciones, la entropía tiene el mismo valor en el centro de la cadena. Esto confirma que las rotaciones mantuvieron la separación en espín, como se esperaba. En la figura 4.7b se muestra la entropía de sitio de cada orbital para la configuración $ON(s_\nu)$. En este gráfico se observa el criterio adoptado para ordenar los orbitales. La entropía de sitio se concentra en el centro de la cadena. Por último, en la figura 4.7c se muestra el número de ocupación de los orbitales en la configuración $ON(n_\nu)$. Para cada mitad de la cadena se observa la superficie de Fermi. Se ve claramente que la rotación al espacio de los Orbitales Naturales extremiza la ocupación de los orbitales.

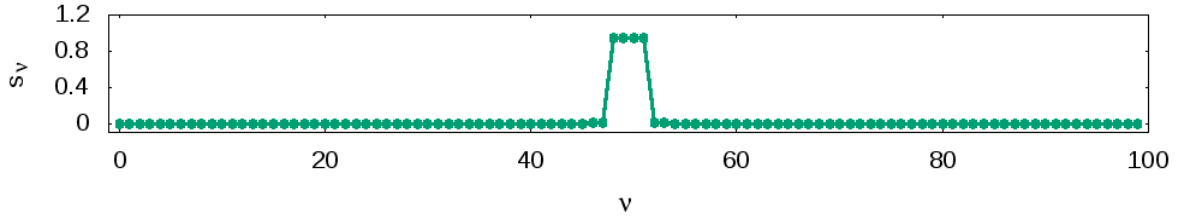
Además, en el último barrido se obtiene la cantidad de estados conservados m en función de la partición realizada. Los resultados para las tres configuraciones se muestran en la figura 4.8.

Se observa que la cantidad almacenada de estados es considerablemente menor en el espacio Orbitales Naturales para ambas rotaciones. Este resultado muestra que la eficiencia aumentó significativamente. Esto se ve reflejado en el tiempo de ejecución de los programas. Ejecutando los programas en la misma computadora, se vio que, haciendo la rotación al espacio de los Orbitales Naturales, el programa se ejecuta aproximadamente 15 veces más rápido para ambas rotaciones.

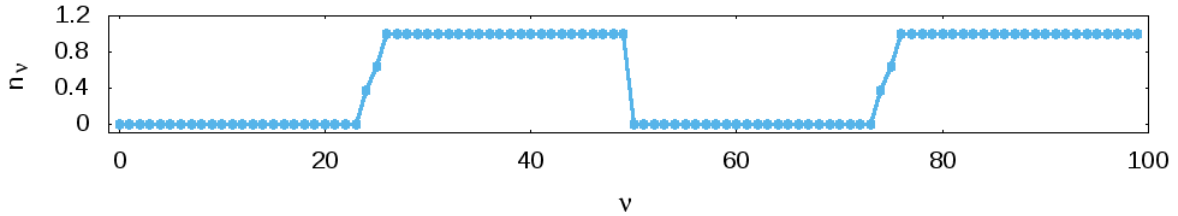
Para terminar, se muestran los espectros de autovalores de la matriz densidad pa-



(a) Entropía de entrelazamiento en función de la partición para el modelo de una impureza de Anderson unidimensional. Se utilizaon tres configuraciones: la configuración Cadena Uniforme y dos rotaciones al espacio Orbitales Naturales $ON(s_i)$ y $ON(n_i)$.



(b) Entropía de sitio de los orbitales en la configuración $ON(s_i)$.



(c) Número de ocupación de los orbitales en la configuración $ON(n_i)$.

Figura 4.7: Entropía en la configuración cadena uniforme del modelo de Anderson unidimensional.

ra distintas particiones. Se comparan dichos espectros para las tres configuraciones utilizadas. En la figura 4.9 se muestran los resultados cuando el corte se realiza en $L = 24$.

Se observa que el espectro de autovalores decae lentamente en el caso de la Cadena Uniforme. Esto revela una pobre eficiencia del método al realizar la partición en $L = 24$. Para el caso de la rotación $ON(s_v)$, se tiene que los autovalores decaen mucho más rápidamente que el caso anterior. De hecho, en este caso, el primer autovalor es igual a 1 y los otros son números menores que 10^{-10} . Esto revela que, para esta partición, almacenando un único estado, se realiza una aproximación satisfactoria. De

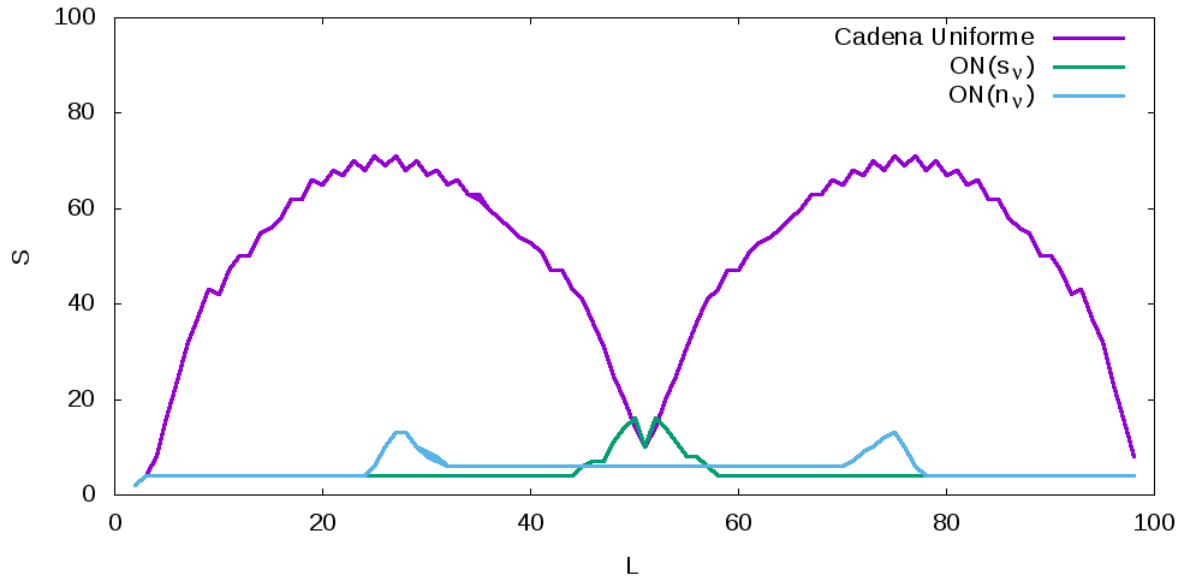


Figura 4.8: Cantidad de estados conservados m en función de la partición para el modelo de una impureza de Anderson unidimensional. Se utilizaron la configuraciones Cadena Uniforme, $ON(s_v)$ y $ON(n_v)$. Los parámetros utilizados son: $N = 100$ sitios, $t = 1$, $U = 1$ y $\epsilon_l = 0$.

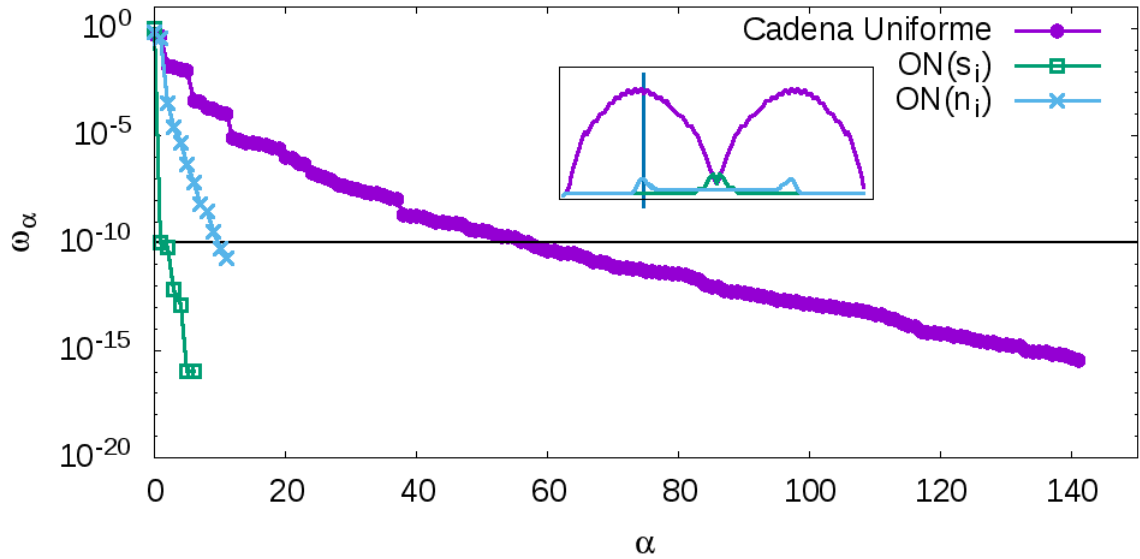


Figura 4.9: Espectro de autovalores de la matriz densidad cuando la partición se realiza en $\frac{1}{4}$ de la cadena en las configuraciones Cadena Uniforme y Orbitales Naturales para el modelo de Anderson unidimensional.

todas maneras, se decidió que en la ejecución del programa se almacene un mínimo de 4 estados. Por último, el caso de la rotación $ON(n_v)$ es un caso intermedio de los dos anteriores.

En la figura 4.10 se muestran resultados del espectro de autovalores cuando la partición se realiza en la mitad de la cadena.

Se observa que los tres espectros son similares. Esto es consecuencia de la separación en espín del sistema.

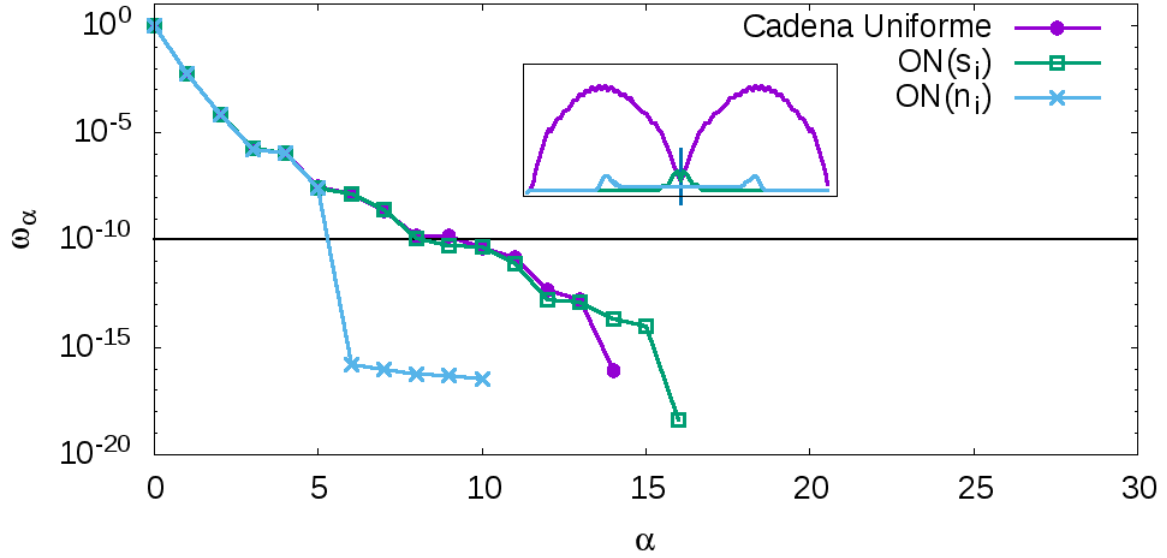


Figura 4.10: Espectro de autovalores de la matriz densidad cuando la partición se realiza en la mitad de la cadena en las configuraciones Cadena Uniforme y Orbitales Naturales para el modelo de Anderson unidimensional.

A continuación se presenta la configuración Estrella y se hace un estudio similar al que se hizo para la Cadena Uniforme.

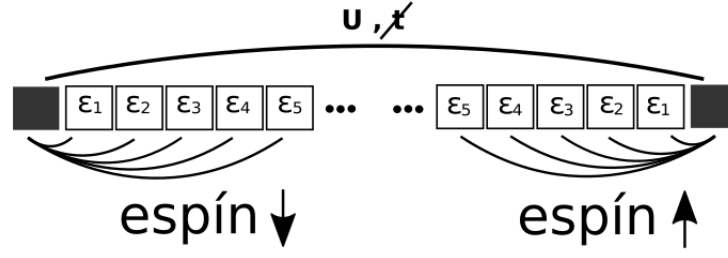
4.4. Configuración Estrella

La segunda configuración estudiada es la Estrella [15]. En esta configuración, los sitios del baño se acoplan directamente a la impureza y no se vinculan entre sí. El Hamiltoniano que describe el modelo es el que se muestra en la ecuación 4.3[6].

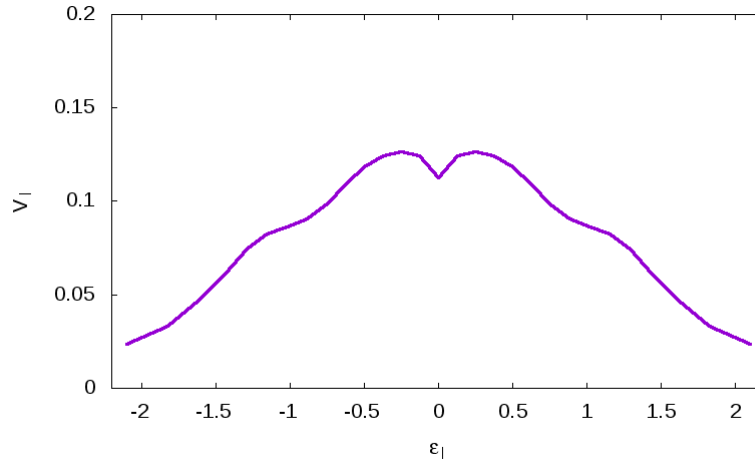
$$\begin{aligned}
 H &= H_{imp} + H_{bath} + H_{hyb} \\
 H_{imp} &= U \left(n_{0,\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{0,\downarrow} - \frac{1}{2} \right) \\
 H_{bath} &= \sum_{l=1}^L \sum_{\sigma} \epsilon_l c_{l,\sigma}^{\dagger} c_{l,\sigma} \\
 H_{hyb} &= \sum_{l=0}^L \sum_{\sigma} \left(V_l c_{0,\sigma}^{\dagger} c_{l,\sigma} + h.c. \right)
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

Los sitios del baño se vinculan directamente con la impureza, que se encuentra en la posición $l = 0$ a través del coeficiente V_l . Como en la Cadena Uniforme, también se implementó la separación por espín. Se hizo una variante respecto de la configuración anterior, en este caso los sitios de la impureza se ubicaron en los extremos de la red unidimensional. Una representación gráfica de la configuración se muestra en la figura

4.11.

**Figura 4.11:** Esquema de la configuración estrella separada por espín.

Se ejecutó el programa con esta configuración utilizando una cadena de 60 sitios en total, es decir, 30 de cada espín. Los valores de V_l y ϵ_l , que caracterizan completamente al baño, se grafican en la figura 4.12.

**Figura 4.12:** Parámetros del baño.

Se realizó la comparación de la configuración Estrella con la Cadena para el mismo problema. El Hamiltoniano de la Cadena se calcula tridiagonalizando el Hamiltoniano de la Estrella. El Hamiltoniano de la Cadena debe ser tridiagonal porque en esta configuración sólo existen interacciones a primeros vecinos. Cabe destacar que no se trata del caso de la Cadena Uniforme, pues los elementos de *hopping* no serán todos iguales. La tridiagonalización se efectúa mediante el método de Lanczos.

En la ejecución del programa, se hicieron cuatro barridos después del crecimiento y se utilizó el criterio del peso descartado menor que 10^{-10} para ambas configuraciones. En la figura 4.13 se muestran resultados de entropía y m en función de la partición realizada en el último barrido.

Se ve que la configuración Estrella reduce drásticamente el costo computacional del método. Además, el gráfico de la entropía en función de la partición muestra que en el centro de la red, la entropía es la misma para ambas configuraciones. Esto quiere decir que la configuración Cadena asociada a la Estrella, mantiene la separación por espín.

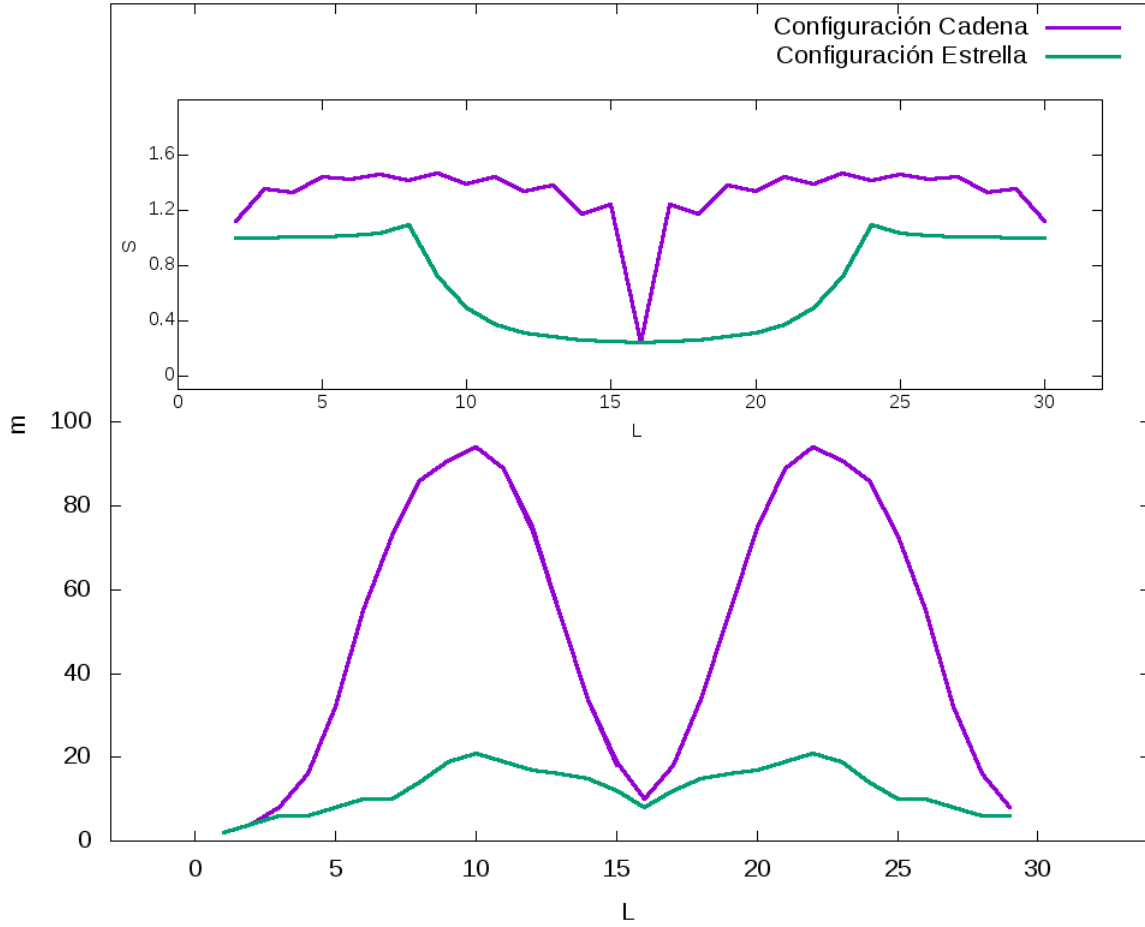


Figura 4.13: m en función de la partición realizada para el sistema SIAM. Se utilizaron las configuraciones Cadena y Estrella. En la figura interna se muestra la entropía de entrelazamiento en función de la partición.

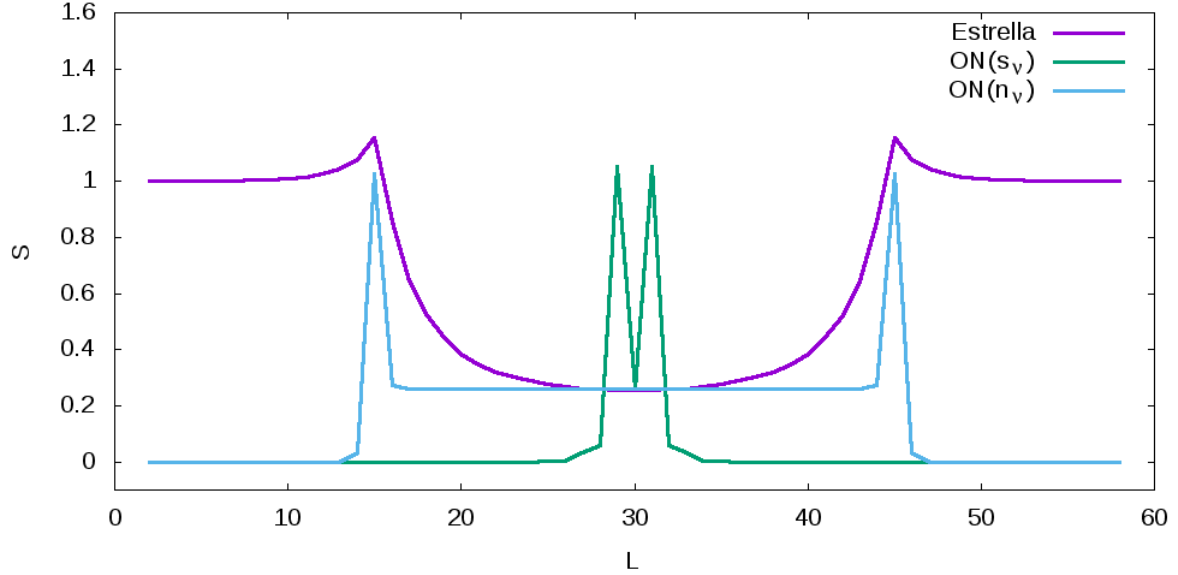
A continuación, se realiza la rotación al espacio de los Orbitales Naturales a partir de la configuración Estrella.

4.5. Configuración Estrella. Orbitales Naturales

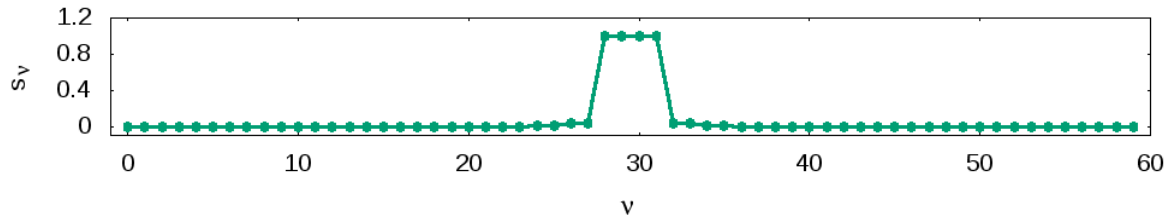
Se realizaron dos rotaciones al espacio de orbitales Naturales. Como para el caso de la Cadena Uniforme, las rotaciones se hicieron manteniendo la separación en espín y utilizando los criterios de entropía de sitio y de número de ocupación. Con estos criterios se obtienen las rotaciones $ON(s_\nu)$ y $ON(n_\nu)$ respectivamente. El único cambio que hay que tener en cuenta para obtener las rotaciones es que en este caso, los sitios de la impureza se encuentran en los extremos de la red. Más allá de esto, el procedimiento para encontrar las matrices de rotación es análogo al explicado en la configuración Cadena Uniforme.

Con estas matrices de rotación, se ejecutó el programa realizando cuatro barridos después del crecimiento. En el último barrido se calculó la entropía de entrelazamiento

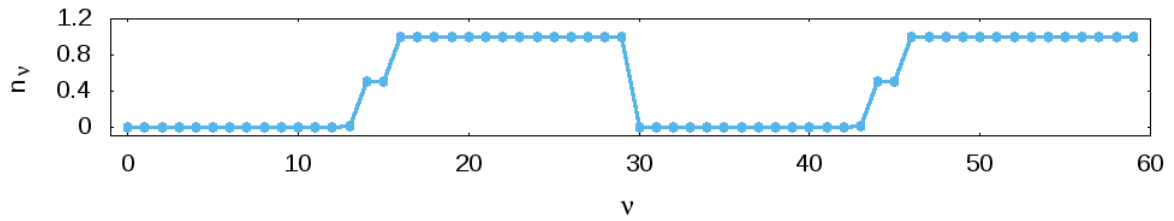
en función de la partición para las tres representaciones. Los resultados se muestran en la figura 4.14.



(a) Entropía de entrelazamiento en función de la partición para el modelo de una impureza de Anderson unidimensional. Se utilizaron tres configuraciones: la configuración Estrella y dos rotaciones al espacio Orbitales Naturales $ON(s_i)$ y $ON(n_i)$.



(b) Entropía de sitio de los orbitales en la configuración $ON(s_i)$.



(c) Número de ocupación de los orbitales en la configuración $ON(n_i)$.

Figura 4.14: Entropía en la configuración estrella del modelo de Anderson unidimensional.

En la figura 4.14a se observa que para la configuración $ON(n_v)$, la entropía disminuye para todas las particiones. Para la configuración $ON(s_v)$, la entropía también disminuye, salvo en el centro de la red. Además, para todos los casos, en el centro de la red, la entropía tiene el mismo valor. Otra vez, esto es un indicador de la separación en espín. En la figura 4.14b se muestra la entropía de sitio de los orbitales de la configuración $ON(s_v)$. Se ve que la entropía de sitio se concentra en el centro de la red. Por último, en la figura 4.14c se observa la ocupación de los orbitales de la configuración

$ON(n_\nu)$.

Además, se obtuvo la cantidad de estados conservados m en cada partición para el último barrido. El resultado se muestra en la figura 4.15.

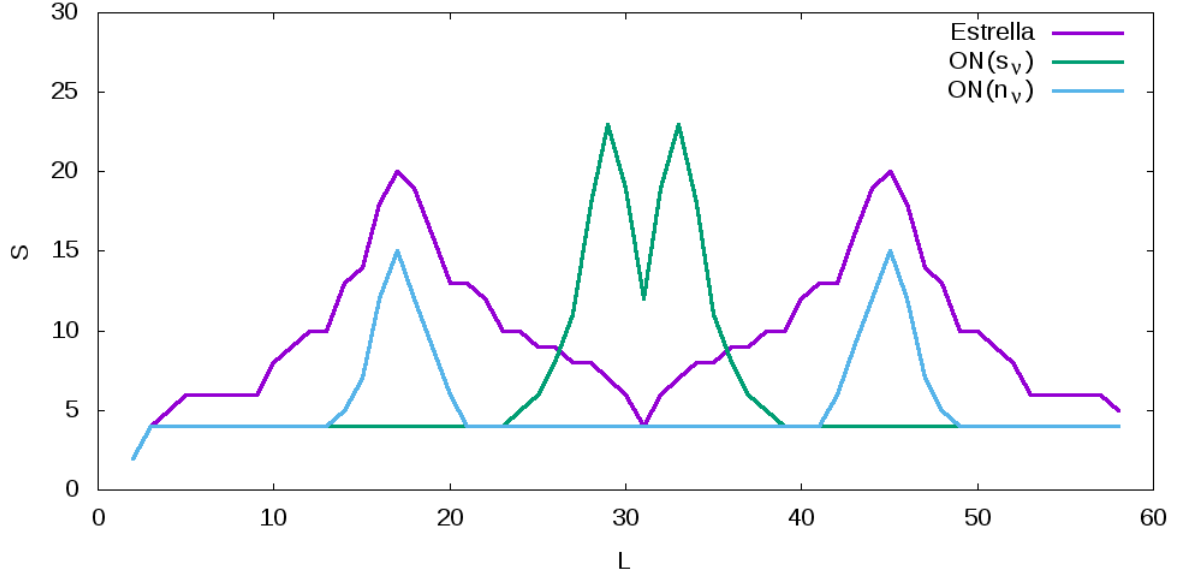


Figura 4.15: m en función de la partición para las configuraciones Estrella, $ON(s_\nu)$ y $ON(n_\nu)$ en el modelo de Anderson unidimensional. Se utilizó una red de 60 sitios separada en espín.

Se ve que la cantidad de estados conservados m se reduce para casi todas las particiones realizadas. Esto se ve reflejado en la reducción del costo computacional como vimos anteriormente. En este caso los tiempos de ejecución de los programas son similares con una ligera ventaja para las configuraciones de Orbitales Naturales. Si bien el m se reduce notoriamente, la cantidad de términos generados en el Hamiltoniano, aumenta luego de hacer la rotación. Esto hace que la ventaja no sea tan clara a favor de los Orbitales Naturales.

Otra forma de ver la ventaja de realizar la rotación al espacio de los Orbitales Naturales es cambiando el criterio para descartar estados en la renormalización. Si no se tiene en cuenta el peso descartado y se establece una cantidad de estados almacenados m fija, se obtienen distintos valores de energía del estado fundamental para distintos m . Entonces, se calcula la diferencia entre la energía obtenida en función del m fijo y una energía de referencia E_0 que se calcula estableciendo un m grande. Se calcula $E(m) - E_0$ para tres configuraciones: la configuración Cadena Uniforme, la Estrella y la $ON(s_\nu)$. Los resultados se muestran en la figura 4.16.

Se ve que, dado un m , la energía del estado fundamental se acerca más a la de referencia E_0 para el caso de Orbitales Naturales. Se observa que esta mejoría se da en varios órdenes de magnitud respecto de la configuración Cadena Uniforme y en un orden de magnitud respecto de la Estrella.

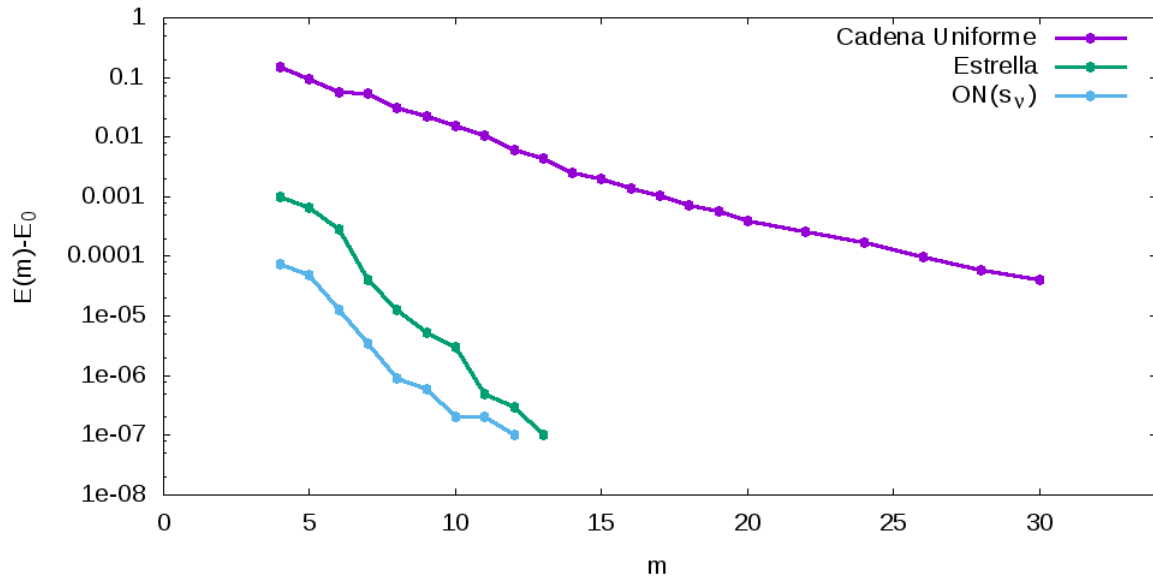


Figura 4.16: $E - E_0$ en función de m para las configuraciones Cadena Uniforme, Estrella y $ON(s_v)$ del SIAM unidimensional. E_0 se calculó utilizando $m = 128$.

4.6. Configuración Cadena de Wilson

La última configuración estudiada es la Cadena de Wilson. Este modelo se trató en el capítulo 2 cuando se explicó el método NRG. El Hamiltoniano se muestra en la ecuación 2.6. Se trata de una configuración tipo cadena con elementos de *hopping* con discretización logarítmica como se muestra en la ecuación 2.7. Los sitios representan las distintas escalas de energía del problema.

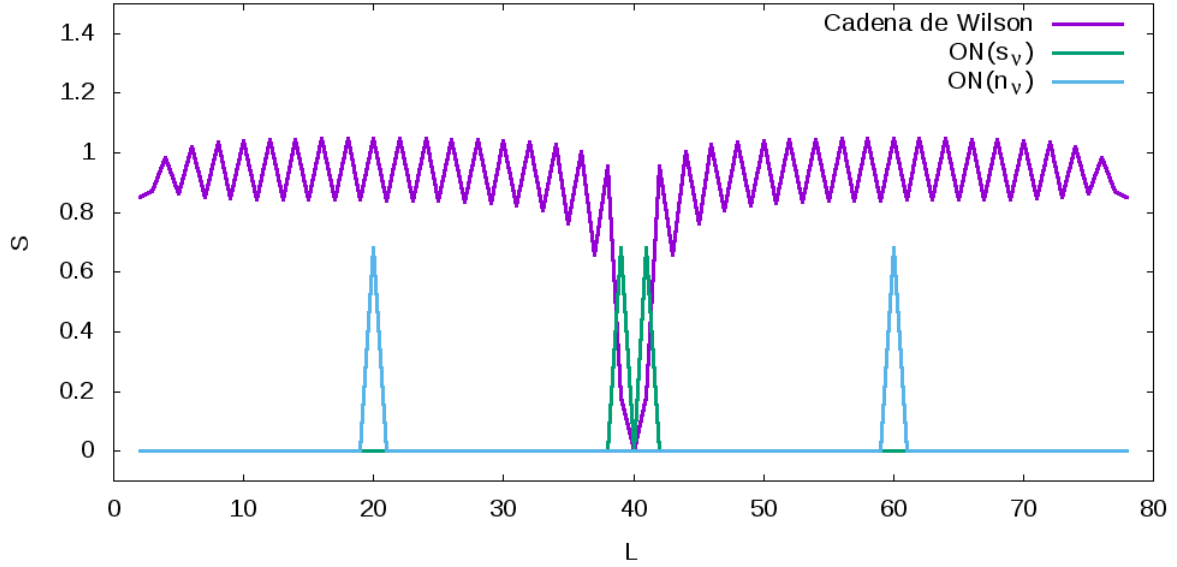
Se realizaron las rotaciones $ON(s_v)$ y $ON(n_v)$ que se utilizaron para las configuraciones anteriores. Se calculó la entropía de entrelazamiento en función de la partición. Se utilizó el criterio del peso descartado menor que 10^{-10} . Los resultados se muestran en la figura 4.17.

En la figura 4.17a se muestra la entropía en función de la partición. Se observa que la entropía se reduce significativamente en las representaciones de Orbitales Naturales. En este caso, la entropía también es la misma para las tres configuraciones en el centro de la cadena. Nuevamente, esto indica la separación en espín. Además, en la figura 4.17b se muestra la entropía de sitio de los orbitales de la configuración $ON(s_v)$ y en la figura 4.17c, el número de ocupación de los orbitales de $ON(n_v)$.

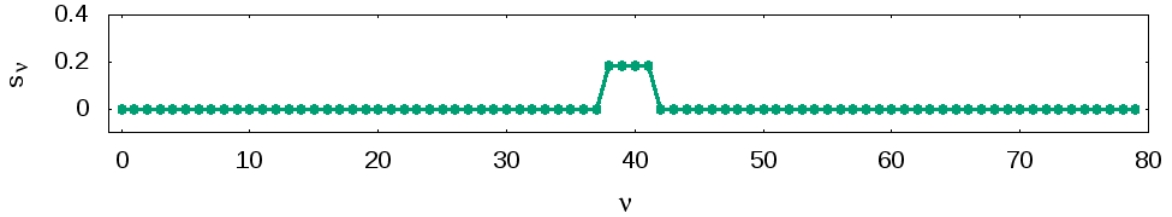
Además, en la figura 4.18 se muestra la cantidad de estados conservados en función de la partición en el último barrido.

Se observa que la cantidad de estados conservados es mucho menor en todas las particiones. Esto se ve reflejado en el tiempo de ejecución. El método en los espacios de Orbitales Naturales es 23 veces más rápido que en el espacio de la Cadena de Wilson.

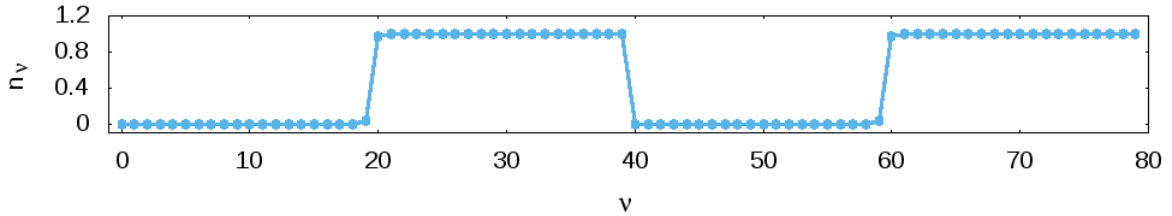
Por último, se realizó una comparación con el programa que resuelve el problema



(a) Entropía de entrelazamiento en función de la partición para el modelo de una impureza de Anderson unidimensional. Se utilizaron tres configuraciones: la configuración Cadena de Wilson y dos rotaciones al espacio Orbitales Naturales $ON(s_i)$ y $ON(n_i)$.



(b) Entropía de sitio de los orbitales en la configuración $ON(s_i)$.



(c) Número de ocupación de los orbitales en la configuración $ON(n_i)$.

Figura 4.17: Entropía en la configuración cadena de Wilson del modelo de Anderson unidimensional.

con el método NRG. Este programa almacena una cantidad de estados fija y hace la renormalización teniendo en cuenta los autoestados de baja energía del Hamiltoniano. Para hacer la comparación, se utilizó el criterio de fijar la cantidad de estados almacenados m en el DMRG para dos configuraciones: Cadena de Wilson y $ON(s_i)$.

Para cada configuración, se calculó la energía del estado fundamental en función de m y se calculó la diferencia con una energía de referencia E_0 que fue calculada con el método DMRG con la Cadena de Wilson utilizando $m = 128$.

Se ve que, para un m dado, el método DMRG obtiene un resultado más cercano a E_0 en varios órdenes de magnitud. Además, como ya se vio, realizar el cambio de

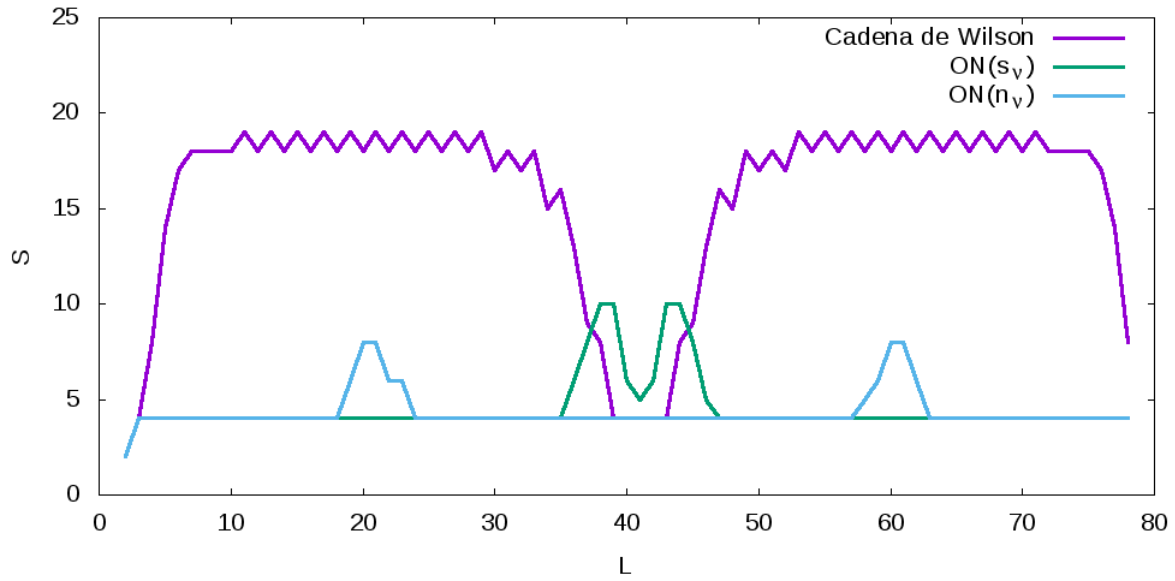


Figura 4.18: m en función de la partición para las configuraciones cadena de Wilson, $ON(s_\nu)$ y $ON(n_\nu)$ en el modelo de Anderson unidimensional.

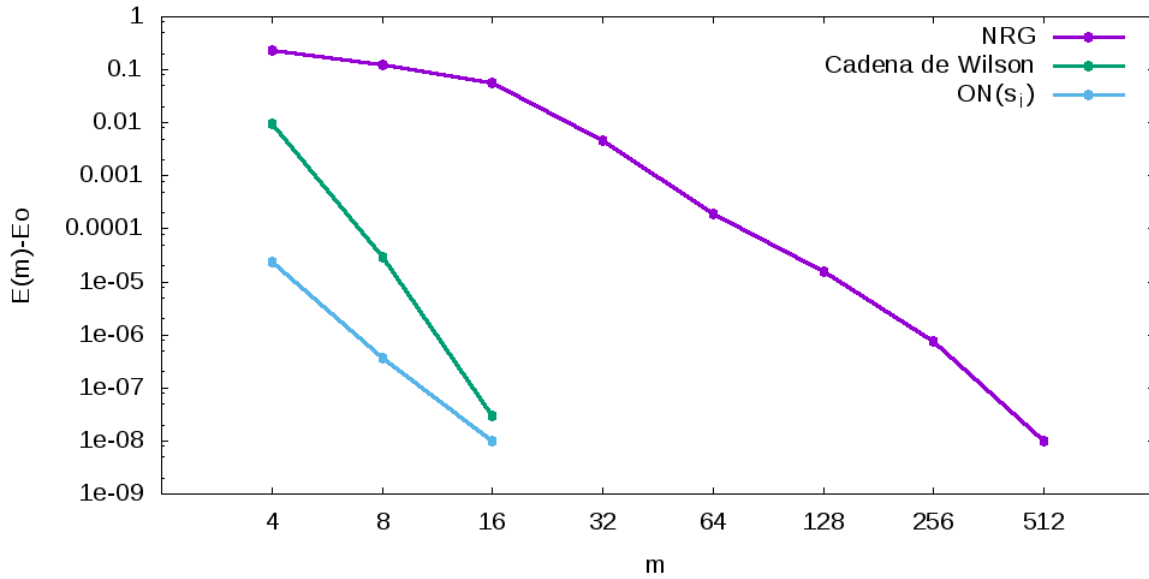


Figura 4.19: Diferencia de energía para un m fijo con la energía E_0 para el sistema SIAM resuelto por el método NRG y DMRG con las configuraciones Cadena de Wilson y $ON(s_\nu)$.

representación al espacio de Orbitales Naturales separando por espín incrementa la eficiencia del método.

4.7. Cambios en el orden de los orbitales

Se probaron otros criterios de ordenamiento además del criterio de entropía de sitio [16]. Para definir un tipo de ordenamiento distinto, se presenta el concepto de información mutua entre orbitales, el cual se muestra en la ecuación 4.4.

$$I_{ij} = s_{ij} - s_i - s_j, \quad (4.4)$$

donde I_{ij} es la información mutua entre los sitios i y j . Además, s_i es la entropía de sitio. La entropía de dos sitios s_{ij} se define de forma análoga utilizando la matriz densidad ρ_{ij} .

La idea del orden propuesto es minimizar la distancia de entrelazamiento, definida como la función de costo que se muestra en la ecuación 4.5.

$$I_{dist} = \sum_{ij} I_{ij} \|i - j\|^\eta \quad (4.5)$$

En esta definición, se ve que el entrelazamiento mutuo es pesado por la distancia entre orbitales en la red. Teniendo esto en mente, para cada red, habría que generar todos los ordenamientos posibles, calcular la función I_{dist} y elegir la red que corresponde a la menor distancia. Es decir, habría que generar $N!$ ordenamientos distintos, donde N es la cantidad de orbitales en la red. Por suerte no es necesario hacer esto, porque para el caso $\eta = 2$, el problema de minimización de la función de costo está resuelto. Se trata de un problema de teoría de grafos. La solución está dada por el vector de Fiedler [17].

El primer caso a estudiar es el de configuración estrella vista anteriormente. Se ejecutó el programa para esta configuración realizando cuatro barridos después del crecimiento. Al finalizar el último barrido se calculó la matriz de entropía mutua I_{ij} . A partir de estos resultados, se calculó el orden del vector de Fiedler y se volvió a ejecutar el programa, esta vez con los orbitales ordenados según este criterio. Las matrices I_{ij} de la configuración original y de la configuración ordenada se muestran en la figura 4.20.

Además, se calculó la entropía de entrelazamiento y el m en cada partición realizada para ambas configuraciones. Los resultados se muestran en la figura 4.21.

Se observa que la entropía de entrelazamiento se concentra en el centro de la cadena. Además, en la mitad de la cadena se obtiene el mismo valor de entropía. Esto nos dice que el orden propuesto por el vector de Fiedler mantuvo la separación por espín. También se ve que el orden propuesto no reduce la cantidad de estados conservados en cada partición. En este caso, el costo no se reduce y no es conveniente realizar este tipo de ordenamiento. Se probó el ordenamiento propuesto por el vector de Fiedler para otras configuraciones sin éxito.

Por último, se propuso otro tipo de ordenamiento. En este caso, se trató de un ordenamiento manual de los orbitales. Para esto se utilizó como punto de partida una configuración de Orbitales Naturales sin separar por espín. El esquema de la matriz de rotación utilizada se muestra en la figura 4.22.

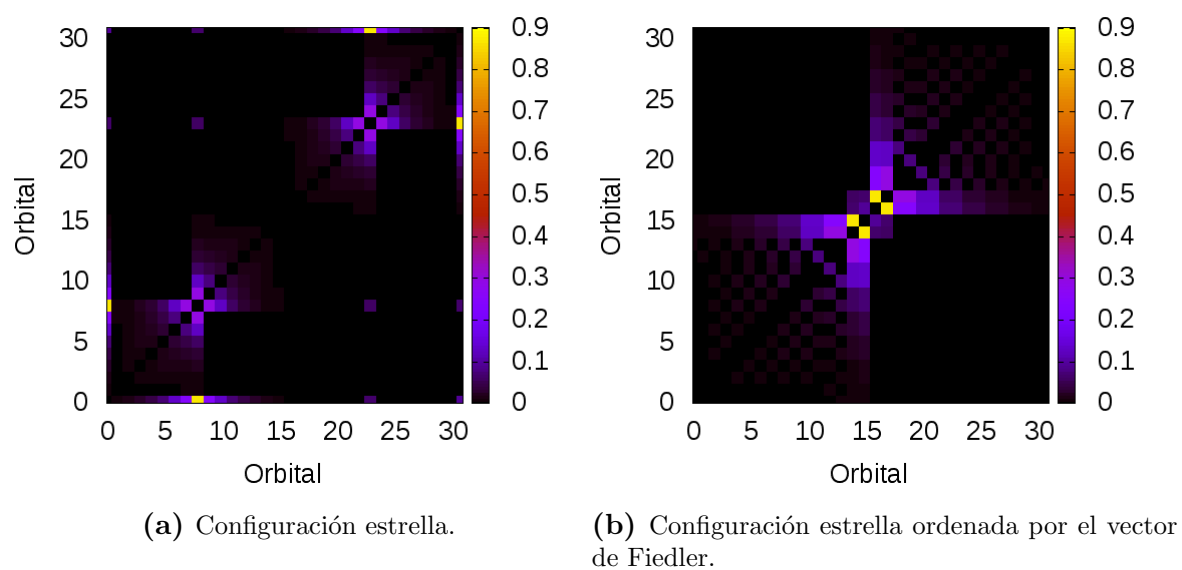


Figura 4.20: Matriz de información mutua I_{ij} .

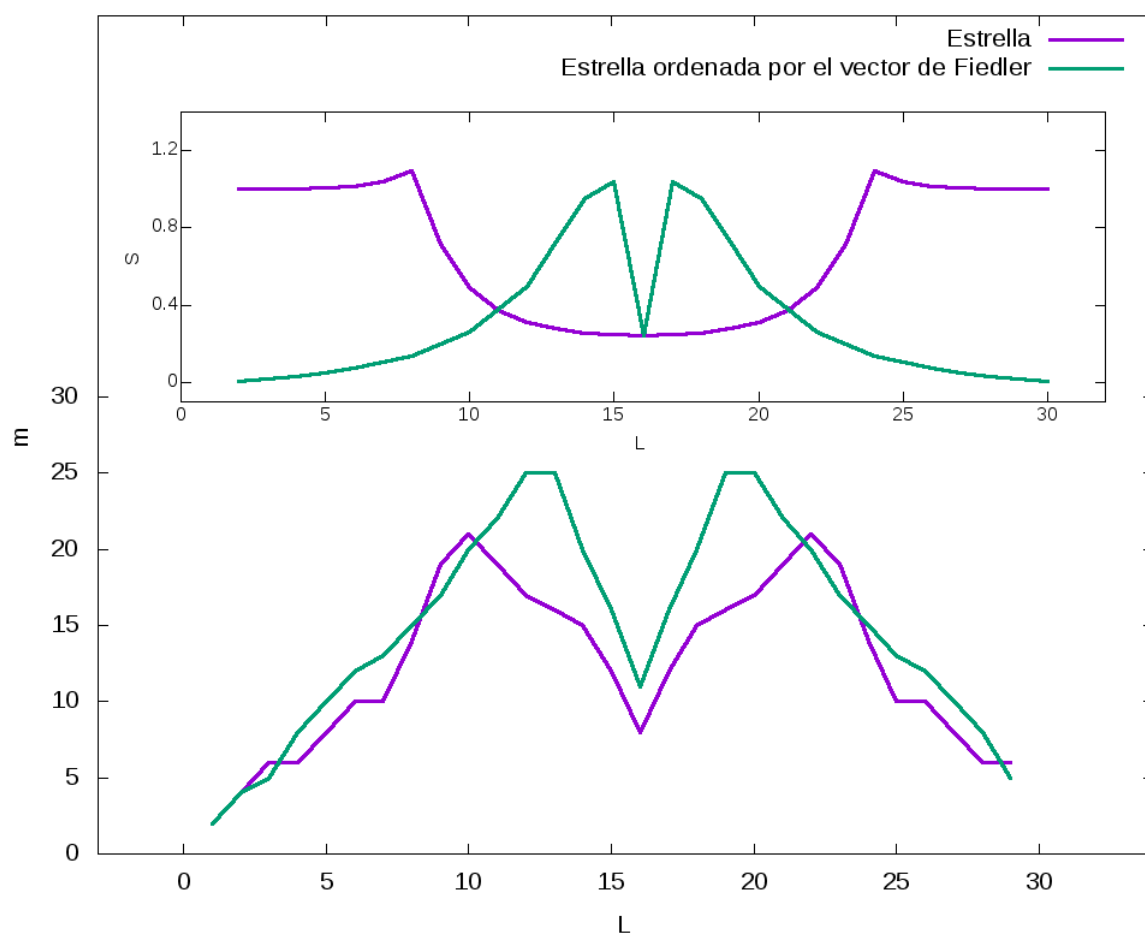


Figura 4.21: m en función de la partición realizada para la configuración estrella y ordenando los orbitales según el criterio del vector de Fiedler. En la figura interna se muestra la entropía de entrelazamiento en función de la partición.



Figura 4.22: Esquema de la matriz de rotación utilizada.

Utilizando esta configuración nueva, se ejecutó el programa y se calculó la matriz I_{ij} . Con estos resultados, se realizó un ordenamiento manual, buscando reducir la cantidad de estados conservados m en la ejecución del programa. Las matrices I_{ij} de la configuración de partida y del mejor orden manual que se obtuvo se muestran en la figura 4.23.

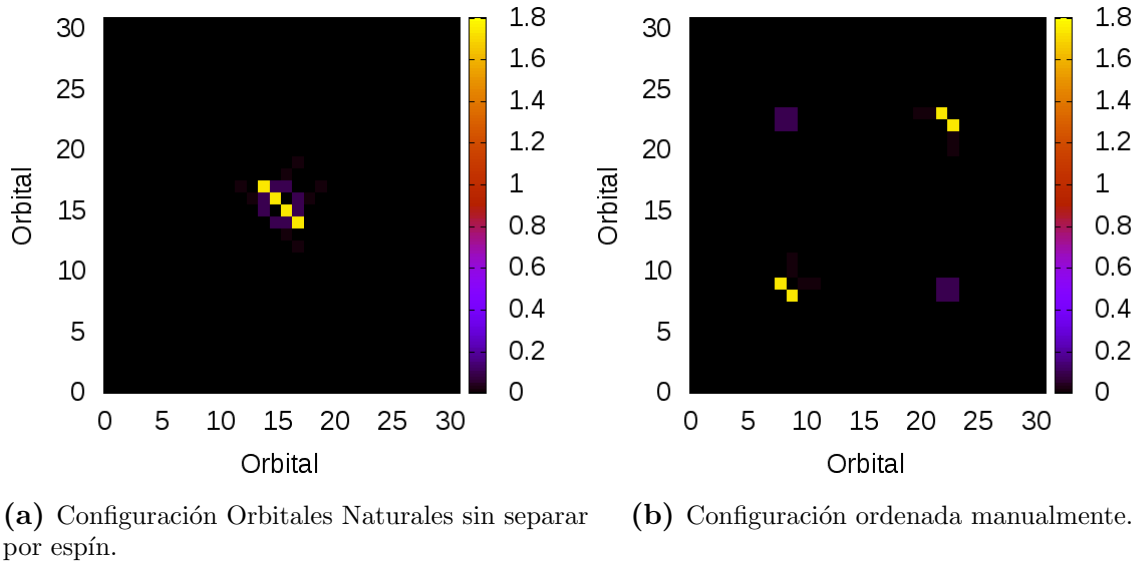


Figura 4.23: Matriz de información mutua I_{ij} .

A continuación se grafica la entropía de entrelazamiento y el m en cada partición para evaluar la conveniencia de realizar este ordenamiento.

Se observa que, en este caso, se incrementa la eficiencia del método. De todas maneras, se trata de un ordenamiento manual. Esto quiere decir que para cada configuración distinta, habría que ordenar con un criterio en particular. Los intentos de generalizar el orden manual no tuvieron éxito.

En este capítulo se vio el núcleo de este trabajo. Se ve que la rotación al espacio

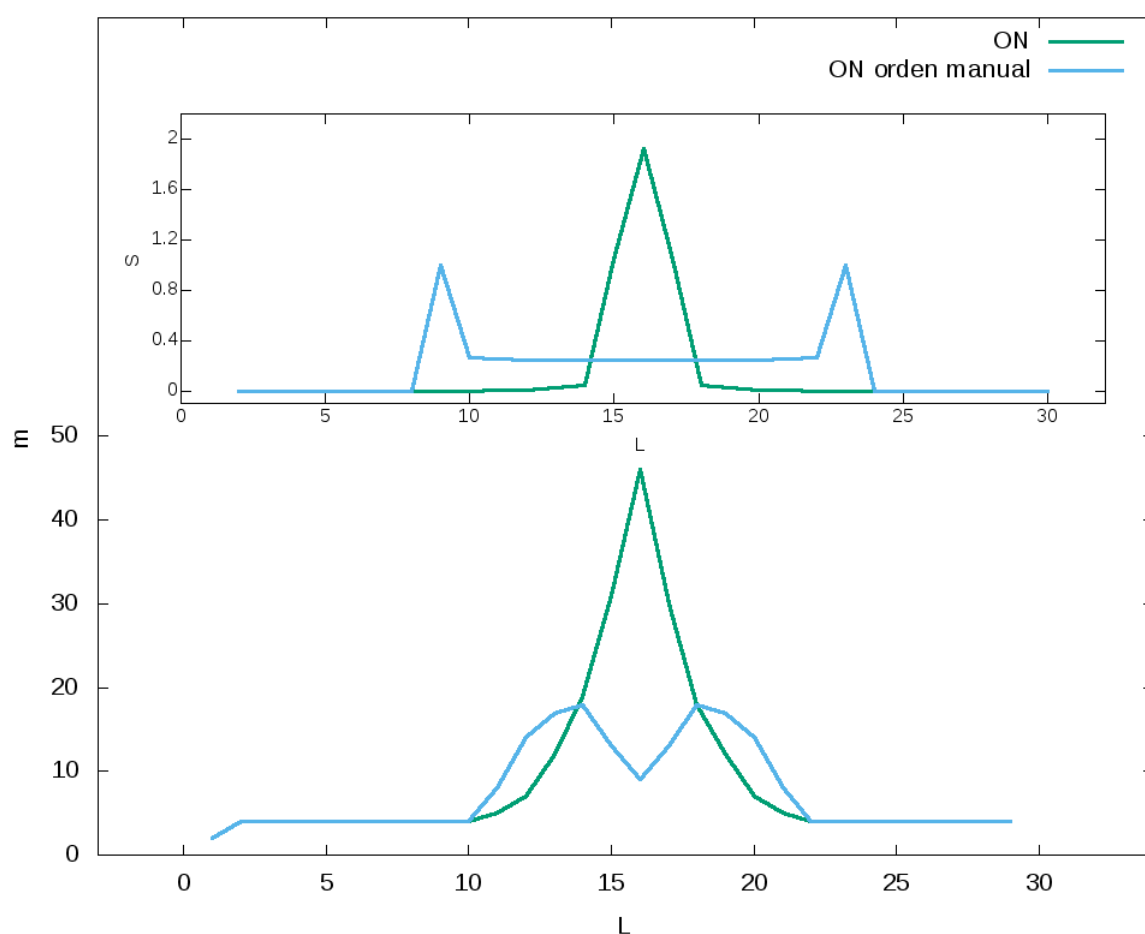


Figura 4.24: m en función de la partición realizada para la configuraciones ON y ON ordenado de forma manual. En la figura interna se muestra la entropía de entrelazamiento en función de la partición.

de Orbitales Naturales incrementa sustancialmente la eficiencia del DMRG cuando se la compara con las configuraciones Cadena Uniforme y de Wilson. Además, se hizo la comparación con el método NRG y se vio que con el DMRG en el espacio de la Cadena de Wilson, se obtienen resultados mucho más precisos de la energía. Estos resultados mejoran aún más cuando a la Cadena de Wilson se le aplica la rotación al espacio de los Orbitales Naturales.

En el caso de la configuración Estrella, también se observa una mejoría en el rendimiento cuando se usan Orbitales Naturales, pues se consiguen energías un orden de magnitud más precisas.

En el próximo capítulo, se hace un análisis similar al de este, pero teniendo en cuenta el estudio de la dinámica a temperatura cero del modelo de una impureza de Anderson.

Capítulo 5

Optimización del DMRG en el cálculo de la dinámica del modelo de Anderson

Entre las aplicaciones del modelo de una impureza de Anderson, se encuentra el método Campo Medio Dinámico, DMFT por sus siglas en inglés [18]. Este método se utiliza para calcular la estructura electrónica de diversos modelos fuertemente correlacionados.

En su versión más simple, el DMFT mapea la red original a un sistema de una impureza en el cual, el baño debe ser determinado de forma autoconsistente hasta alcanzar la convergencia de la función de Green. Por ejemplo, en el caso del modelo de Hubbard, el problema de una impureza asociado es el de Anderson. La forma de calcular la función de Green en el sistema de la impureza es a través del DMRG [19].

Por este motivo, es necesario estudiar la eficiencia del DMRG en el cálculo de la dinámica del modelo de una impureza de Anderson, pues una mejora en la eficiencia del DMRG, implica una mejora mucho mayor para el DMFT, pues este método necesita ejecutar el DMRG varias veces hasta alcanzar la convergencia de la función de Green.

En este capítulo se estudia la dinámica a temperatura cero del modelo de una impureza de Anderson. Como se hizo con el estudio del estado fundamental, la idea es evaluar la eficiencia del DMRG cambiando la representación al espacio de los Orbitales Naturales. Para esto se emplearon las configuraciones Estrella, Cadena Uniforme y Cadena de Wilson.

A continuación se explica cómo se calcula la dinámica, es decir, la función de Green y la densidad de estados con el DMRG.

5.1. Método del vector corrección para la dinámica

Para calcular la función de Green con el DMRG, se utiliza el método del vector corrección [20]. Con este método, se calcula la función de Green en un intervalo de frecuencias $[\omega_1, \omega_2]$. Se empieza por definir una función de Green posible. Esta se muestra en la ecuación 5.1

$$G_{c^\dagger}(\omega) = \langle \psi_0 | c \frac{1}{\omega + i\eta - H} c^\dagger | \psi_0 \rangle, \quad (5.1)$$

con $\eta \rightarrow 0^+$. ω es la frecuencia en la que se calcula la función, ψ_0 es el estado fundamental y c es el operador de creación en la impureza.

A partir de esta función, se calcula la densidad de estados mediante la ecuación 5.2

$$D_{c^\dagger}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{G_{c^\dagger}(\omega)\} \quad (5.2)$$

Para calcular la función de Green se define el vector corrección como se muestra en la ecuación 5.3.

$$|x(\omega)\rangle = \frac{1}{\omega + i\eta - H} |c^\dagger\rangle, \quad (5.3)$$

donde $|c\rangle = c|\psi_0\rangle$. Para no tener que trabajar con números complejos, se calcula la parte real e imaginaria por separado $|x(\omega)\rangle = |x^r(\omega)\rangle + i|x^i(\omega)\rangle$. La parte imaginaria se calcula resolviendo la ecuación 5.4.

$$((H - \omega)^2 + \eta^2) |x^i(\omega)\rangle = -\eta |c\rangle \quad (5.4)$$

Esta ecuación se resuelve por el método del gradiente conjugado. La parte real se calcula directamente a través de la ecuación 5.5.

$$|x^r(\omega)\rangle = \frac{1}{\eta} (H - \omega) |x^i(\omega)\rangle \quad (5.5)$$

A partir del vector corrección, la función de Green se puede calcular fácilmente utilizando la ecuación 5.6.

$$G_{c^\dagger}(\omega) = \langle c^\dagger | x(\omega) \rangle \quad (5.6)$$

Para calcular el vector corrección con el método DMRG, se cambia el modo en el que se calcula la matriz densidad reducida en cada iteración. Esta debe ser calculada teniendo en cuenta los siguientes estados:

- El estado fundamental $|\psi_0\rangle$.
- El estado $c^\dagger |\psi_0\rangle$.

- Los vectores corrección en los extremos del intervalo de frecuencia que estamos trabajando.

El cálculo de la matriz densidad se realiza como se muestra en la ecuación 5.7.

$$\rho = \sum_{s=1}^M c_s \rho_s, \quad (5.7)$$

donde las ρ_s son las matrices densidad obtenidas a partir de los estados calculados previamente y los c_s son coeficientes elegidos convenientemente. Típicamente se le asigna 0,5 al estado fundamental y el resto se reparte entre los otros vectores, pero no hay un criterio definido para esto. Se realiza de manera empírica.

La metodología empleada es la siguiente: primero se realiza el crecimiento del sistema utilizando la matriz densidad generada sólo a partir del estado fundamental y luego se hacen los barridos usando la matriz densidad 5.7. La idea es que agregando estos estados a la matriz densidad, se optimiza la base en la que se ejecuta el DMRG y es posible obtener valores precisos de la función de Green en el intervalo considerado.

Utilizando esta nueva matriz densidad se realiza el crecimiento y los barridos como se explicó en el capítulo 2. Al finalizar el último barrido, se calcula la función de Green en el intervalo considerado utilizando la ecuación 5.6.

A continuación, se muestran resultados de la aplicación de este método a las distintas configuraciones que vimos en el capítulo 4. En particular, se evalúa la eficiencia del método utilizando la representación Orbitales Naturales.

5.2. Configuración Estrella

La primera configuración a estudiar es la Estrella. El Hamiltoniano del modelo se muestra en la ecuación 4.3. Los parámetros V_l y ϵ_l se grafican en la figura 5.1. Se trata de una hibridización obtenida en una de las iteraciones de un problema del DMFT.

La función de Green que calcula el programa es la que corresponde a crear una partícula en el sitio de la impureza del lado derecho de la red. Se utilizó el criterio del peso descartado menor que 10^{-10} para la renormalización y se realizaron cuatro barridos después del crecimiento. Se consideraron intervalos de frecuencia $\Delta\omega = 0,2$ y se estableció $\eta = 0,2$. La densidad de estados obtenida se muestra en la figura 5.2.

A continuación, para evaluar la eficiencia del método utilizando la representación Orbitales Naturales, se realizaron dos rotaciones a este espacio. Estas se hicieron manteniendo la separación en espín y moviendo las impurezas según el criterio entropía de sitio, como se vio en el capítulo anterior.

La primera rotación tuvo en cuenta sólo el estado fundamental. Es decir, se calculó la matriz densidad de sitio definida en 3.8 con $|\psi\rangle = |\psi_0\rangle$ como se estuvo haciendo

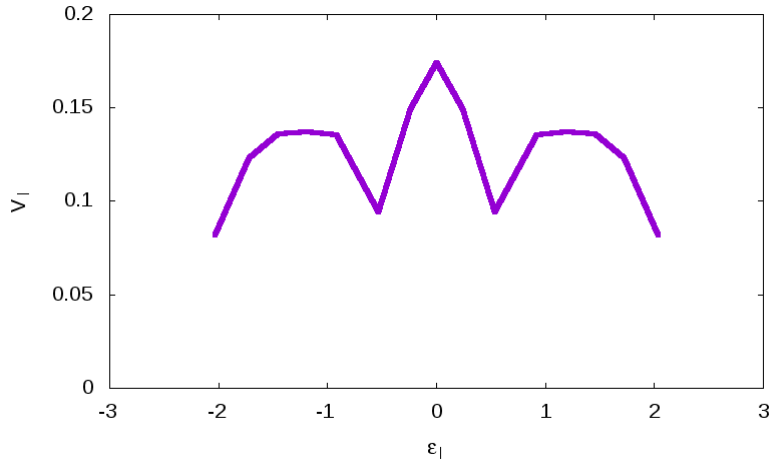


Figura 5.1: Parámetros del baño.

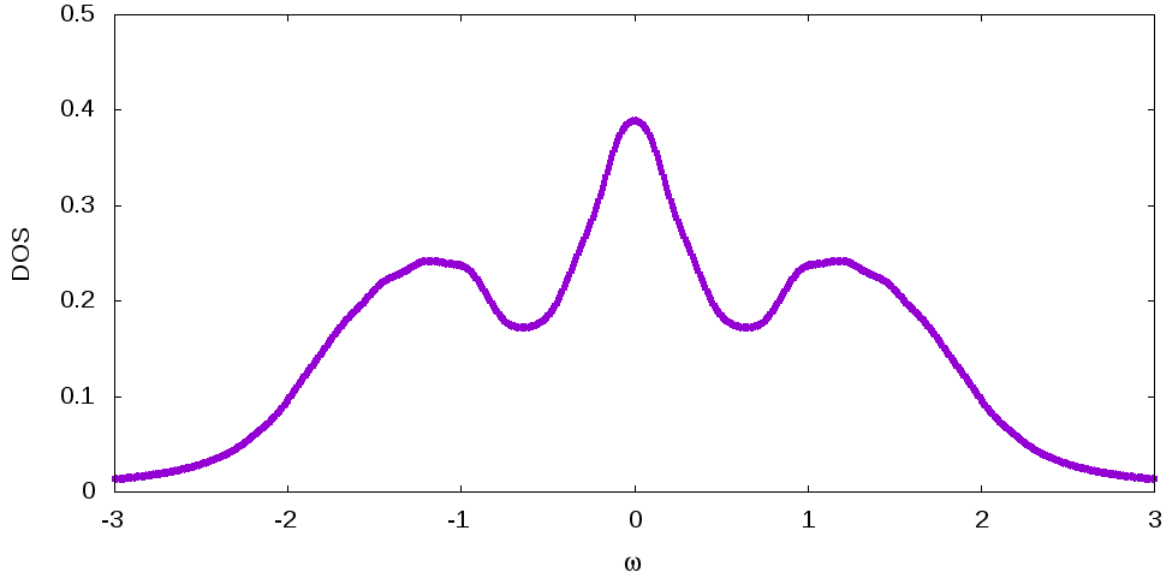


Figura 5.2: Densidad de estados para el modelo de una impureza de Anderson configuración Estrella con la hibridización que se muestra en la figura 5.1.

haciendo a lo largo de todo el trabajo hasta ahora. A esta rotación se la denomina $ON(s_i)$.

La segunda rotación se hizo empleando todos los estados utilizados para construir la matriz densidad 5.7. En este caso, el elemento de matriz densidad D_{ij} utilizado en la generación de los Orbitales Naturales es el que se muestra en la ecuación 5.8.

$$\bar{D}_{ij} = \sum_{\alpha=1}^M \frac{P_{\alpha} \langle \alpha | c_i^{\dagger} c_j | \alpha \rangle}{\langle \alpha | \alpha \rangle} \quad (5.8)$$

A la nueva rotación generada, se la denomina $ON2(s_i)$. Vale la pena destacar que para generar esta matriz de rotación, es necesario ejecutar la dinámica en el espacio de la configuración Estrella para obtener la matriz \bar{D} . En cambio, para generar la rotación

$ON(s_i)$, sólo es necesario obtener el estado fundamental.

Las densidades de estados obtenidas con estas configuraciones coinciden con la que se muestra en la figura 5.2. Esto es de esperarse, pues la densidad de estados no debe cambiar con la representación.

A continuación se analiza la eficiencia del método en el espacio de los Orbitales Naturales. En la figura 5.3 se muestra la cantidad de estados almacenados en función de la partición para el último barrido. En este caso, el intervalo de frecuencias considerado es de $\omega : 0,0 - 0,2$

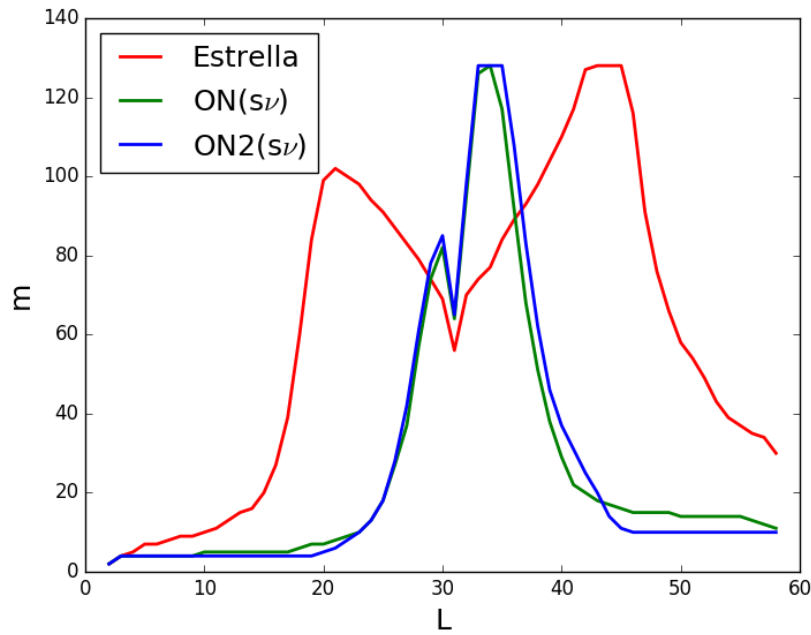


Figura 5.3: m en función de la partición para dos ventanas de frecuencia. El sistema utilizado es el modelo de una impureza de Anderson configuración Estrella y dos configuraciones de Orbitales Naturales. En una de ellas se tiene en cuenta sólo el estado fundamental y en la otra todos los targets calculados en la dinámica.

Lo primero que se ve es que el gráfico ya no tiene la simetría vista en los casos del estudio del estado fundamental. Esto resulta razonable, pues en este caso, se está creando una partícula en un sitio de la impureza determinado. Esto hace que se rompa la simetría.

Además, se observa que la rotación a los espacios $ON(s_\nu)$ y $ON2(s_\nu)$ reduce el costo computacional. Para la configuración $ON(s_\nu)$ se obtuvo que el programa se ejecutó 2.4 veces más rápido y para la configuración $ON2(s_\nu)$ se ejecutó 1.8 veces más rápido. Comparando las configuraciones de Orbitales Naturales entre sí, se puede decir que no resulta conveniente realizar la rotación a $ON2(s_\nu)$, pues, si bien la mejora con respecto a la Estrella es del mismo orden que $ON(s_\nu)$, para obtener la $ON2(s_\nu)$ es necesario ejecutar una dinámica en la configuración Estrella, en cambio, para obtener la $ON(s_\nu)$ alcanza sólo con el estado fundamental.

A continuación, en la figura 5.4 se muestra el mismo cálculo para el intervalo de $\omega : 0,4 - 0,6$.

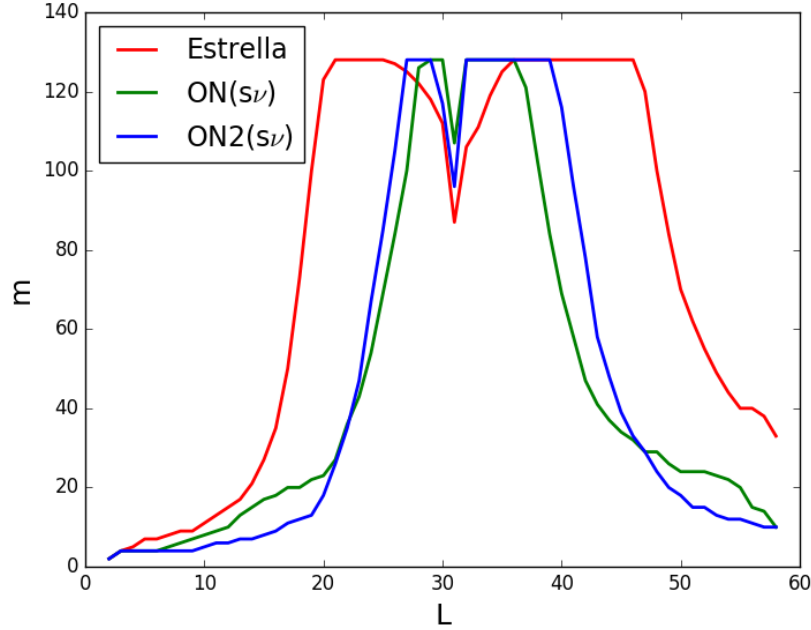


Figura 5.4: m en función de la partición para dos ventanas de frecuencia. El sistema utilizado es el modelo de una impureza de Anderson configuración Estrella y dos configuraciones de Orbitales Naturales. En una de ellas se tiene en cuenta sólo el estado fundamental y en la otra todos los targets calculados en la dinámica.

Se observa que ocurre algo similar a lo que se vio en el caso anterior. Y esta tendencia se repite para todos los intervalos de frecuencia utilizados. Teniendo en cuenta estos resultados se decide desestimar la configuración $ON2(s_\nu)$ y trabajar sólo con la $ON(s_\nu)$. Esto resulta conveniente, pues, como se dijo anteriormente, para generar la rotación $ON2(s_\nu)$, es necesario ejecutar primero la dinámica en la configuración Estrella, y esto debe repetirse para todos los intervalos de frecuencia calculados. En cambio, en el caso de la rotación $ON(s_\nu)$, alcanza con calcular previamente el estado fundamental. Y luego utilizarlo para todos los intervalos de frecuencia.

En la próxima sección, se estudia la configuración Cadena Uniforme.

5.3. Configuración Cadena Uniforme

En esta sección, se emplea la configuración Cadena Uniforme. El Hamiltoniano es el que se muestra en la ecuación 2.6. Se utilizaron sistemas de 64 sitios con elementos de *hopping* $t_l = 0,25$, energía de los sitios del baño $\epsilon_l = 0$ y el potencial U en la impureza se fue variando de 1 a 4. Las funciones de Green calculadas son las correspondientes a crear una partícula en el sitio de la impureza del lado derecho de la red. Las densidades de estados obtenidas para estas configuraciones se muestran en la figura 5.5.

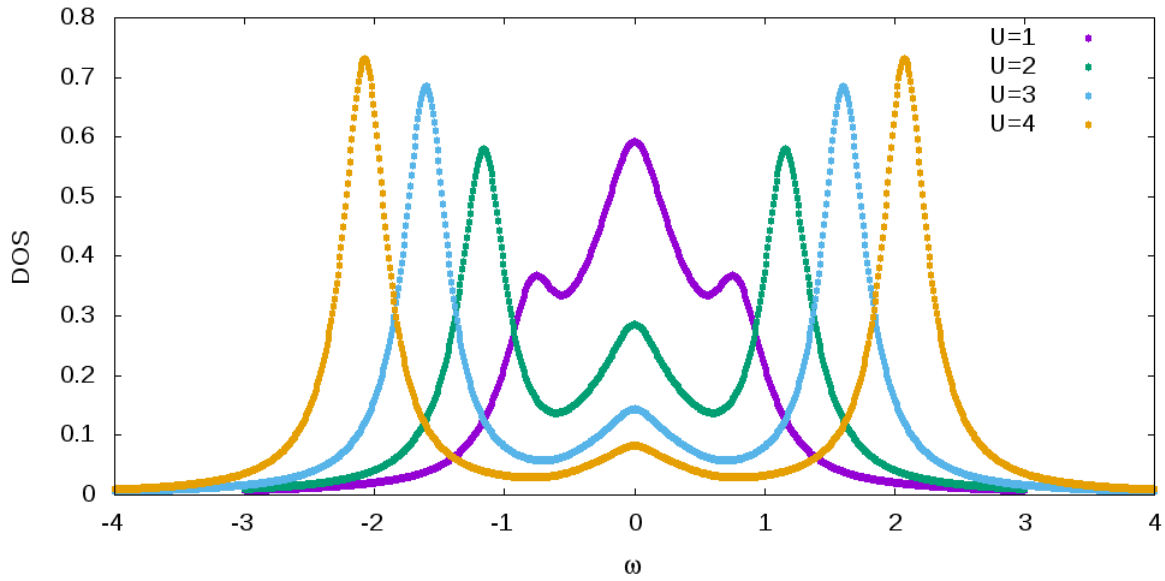


Figura 5.5: Densidades de estados calculadas para el modelo de una impureza de Anderson configuración Cadena. Los parámetros utilizados son $t_l = 0,25$, ϵ_l y se fue variando U de 1 a 4.

Luego, se trabajó sobre la configuración con $U = 3$. Se hizo la rotación al espacio de los Orbitales Naturales. Se realizó la rotación teniendo en cuenta sólo el estado fundamental $ON(s_\nu)$. Se eligió la ventana de frecuencia $[0,0 - 0,2]$ para realizar la comparación entre las dos configuraciones. Se realizaron cuatro barridos. En la figura se muestran el m en función de la partición para el último barrido. Los parámetros utilizados fueron $\eta = 0,2$ y $\Delta\omega = 0,2$.

Además del hecho ya mencionado de que el gráfico ya no presenta la simetría vista en el caso del estado fundamental, se observa que el costo computacional se reduce significativamente. Esto se refleja en el tiempo de ejecución de los programas. Para la configuración $ON(s_\nu)$, el programa se ejecutó 13 veces más rápido que para la Cadena Uniforme. Esta es una disminución de tiempo similar a la que se vio en el estado fundamental.

5.4. Configuración Cadena de Wilson

Por último, se estudió la configuración Cadena de Wilson. Se utilizó una red de 120 sitios. En este caso los elementos de *hopping* están determinados por la discretización logarítmica. Además, se fijó un potencial de $U = 2$.

En este caso, para comparar la ejecución del método en los espacios Cadena de Wilson y $ON(s_\nu)$, se decidió ejecutar el programa utilizando una cantidad de estados conservados m fijo. Además, se compara con una densidad de estados calculada con $m = 128$ en la configuración Cadena de Wilson. En la figura 5.7 se muestran los resultados para $m = 8$.

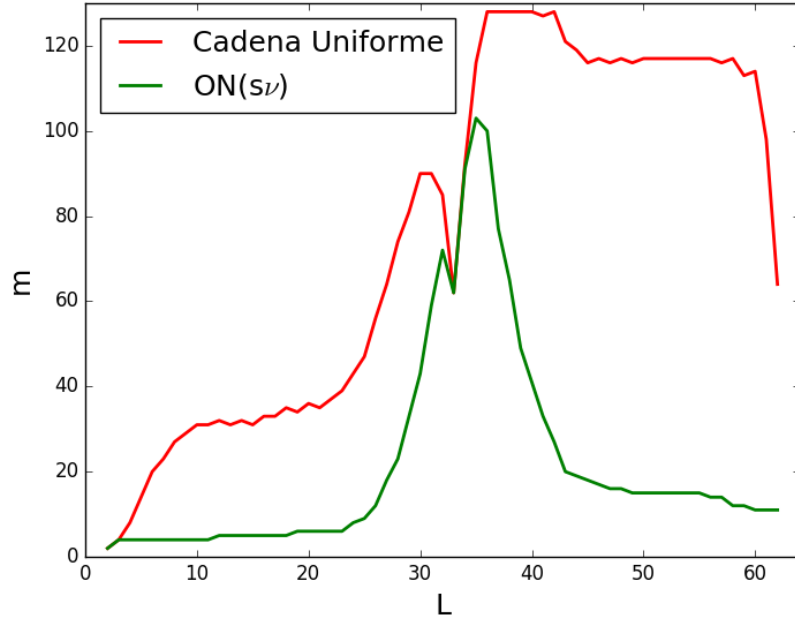


Figura 5.6: m en función de la partición para dos ventanas de frecuencia. El sistema utilizado es el modelo de una impureza de Anderson configuración Estrella y dos configuraciones de Orbitales Naturales. En una de ellas se tiene en cuenta sólo el estado fundamental y en la otra todos los targets calculados en la dinámica.

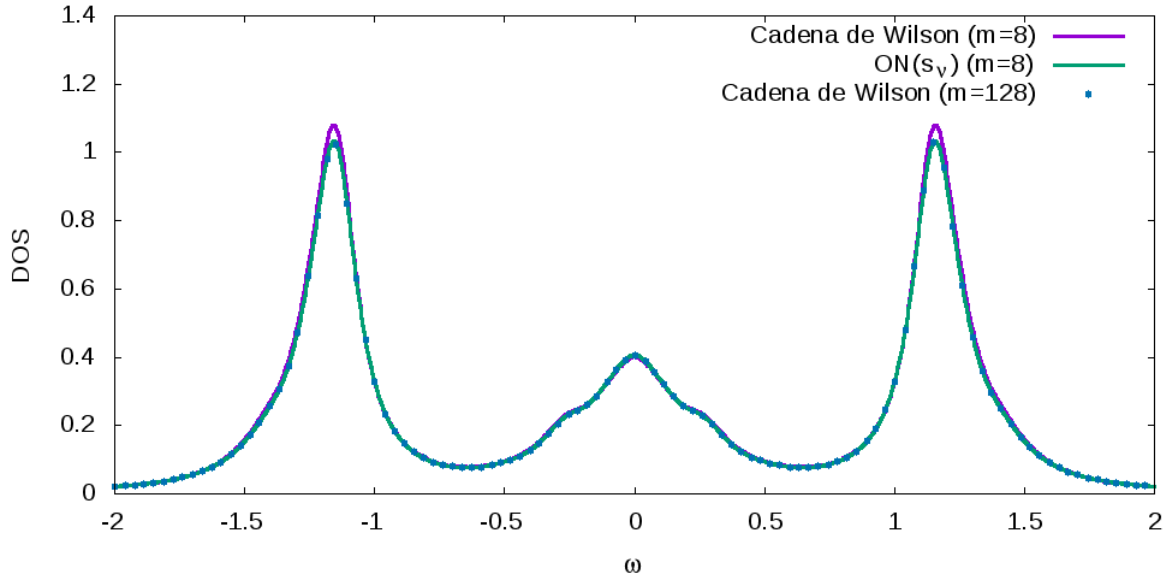


Figura 5.7: Densidad de estados calculadas para el modelo de una impureza de Anderson configuración Cadena con discretización logarítmica y Orbitales Naturales teniendo en cuenta sólo el estado fundamental (ON1). Se utilizó un $m = 8$ fijo para ambas configuraciones.

Se observa que la densidad de estados para la configuración Orbitales Naturales para $m = 8$, coincide con la calculada para $m = 128$. No así el caso de la Cadena de Wilson para $m = 8$ que presenta ciertas diferencias. Sobre todo en los picos, donde los cambios en la curva son más notorios.

En este capítulo se estudió la dinámica a temperatura cero del sistema de una impureza de Anderson y se utilizó la transformación al espacio de los Orbitales Naturales para incrementar la eficiencia del método. Esto se consiguió para los casos Estrella y Cadena Uniforma. Para este último caso, la reducción del costo computacional es muy significativa. En estos dos casos, el estudio de la eficiencia se hizo utilizando el criterio de peso descartado y evaluando el m en función de la partición. El último caso estudiado fue la Cadena de Wilson, el método para comparar la eficiencia fue el de fijar el m y observar el comportamiento de la densidad de estados. Esto también reveló una ventaja para el caso de los Orbitales Naturales. Aunque para obtener una conclusión más rigurosa en este último caso es necesario realizar más pruebas, por ejemplo, variando los parámetros η y $\Delta\omega$. Esto cae dentro de las perspectivas futuras.

Capítulo 6

Conclusiones

En este trabajo tuvo como objetivo optimizar el método DMRG realizando un cambio de representación al espacio de los Orbitales Naturales. Se vio que esta representación es la que minimiza la entropía de sitio de los orbitales. Por ese motivo se eligió para este propósito.

Se utilizó el modelo de una impureza de Anderson unidimensional para realizar las pruebas. Estas pruebas se hicieron para comparar el costo computacional del método en el espacio de partida y en el de los Orbitales Naturales. Se hicieron comparaciones en la ejecución del cálculo del estado fundamental y de la dinámica a temperatura cero.

Se utilizaron tres configuraciones distintas para espacio de partida. Estas representaciones diferían entre sí en la forma en la que la impureza interactúan los sitios en la red. La primera configuración utilizada fue la Cadena Uniforme. En esta configuración se vio una gran diferencia en términos de eficiencia a favor de los Orbitales Naturales. Se vieron ejecuciones hasta 15 veces más rápido.

La segunda configuración estudiada fue la Estrella. En este caso se vio una ligera ventaja para la representación de los Orbitales Naturales, sobre todo en el caso de la dinámica.

El último caso fue el de la Cadena de Wilson. Como en el caso Cadena Uniforme, se logró una mejora sustancial en el método. Además, se hizo la comparación con el método NRG y se obtuvieron energías más precisas en varios órdenes de magnitud. Esta comparación es muy importante porque el NRG es el método por excelencia para la resolución de sistemas de una impureza. En la dinámica se vieron diferencias en el cálculo de la densidad de estados en ambos espacios. Se vio que para una cantidad de estados almacenados fija, la representación Orbitales Naturales obtiene una densidad de estados más precisa.

Teniendo en cuenta todo lo aquí discutido, se concluye que el espacio Orbitales Naturales es conveniente para tratar problemas de una impureza con el DMRG.

Con esta conclusión, se pueden plantear diversos trabajos futuros. Por ejemplo, de-

bería estudiarse el caso de sistemas con más impurezas. Además se puede plantear el método DMFT utilizando al DMRG con Orbitales Naturales para resolver los problemas de una impureza. Por último, se puede investigar problemas con Hamiltonianos de largo alcance.

Apéndice A

Diagonalización del Hamiltoniano por el método de Lanczos

Diagonalizar una matriz de $n \times n$ implica calcular las raíces de un polinomio característico de grado n . Puede ocurrir que, para un problema de este tipo, no se pueda encontrar las raíces en un número finito de pasos. Por este motivo es necesario usar métodos aproximados. En este caso, utilizamos el método de Lanczos para calcular el estado fundamental, es decir el menor autovalor del Hamiltoniano y su autovector asociado.

El método de Lanczos un método de diagonalización de los llamados iterativos y su implementación es muy simple. A partir de un estado inicial aleatorio $|\phi_0\rangle$, generamos una serie de estados aplicando el Hamiltoniano repetidas veces al estado inicial. Los estados generados forman una base de Krylov del espacio, que se muestra en la ecuación [A.1](#).

$$B = \{\phi, H\phi, H^2\phi, \dots, H^n\phi\}. \quad (\text{A.1})$$

Esta es la parte más costosa del método. Cabe notar que el método recae en la aplicación del Hamiltoniano a un estado. Luego en este apéndice, veremos que esto resulta ser una ventaja para el DMRG porque no va a ser necesario generar el Hamiltoniano completo del super bloque.

A continuación, tenemos que ortogonalizar los estados generados. Esto lo logramos mediante el procedimiento de Gram-Schmidt. Con esto obtenemos una base otogonal del espacio de Krylov. Podemos generar y ortogonalizar la base de Krylov en paralelo mediante el algoritmo que se muestra en [1](#). En este algoritmo, $|\phi_{-1}\rangle = 0$ y $|\phi_0\rangle$ es un estado aleatorio normalizado.

Este procedimiento se repite N veces. Generalmente, el método de Lanczos converge luego de realizar $N \approx 100$ iteraciones. La representación del Hamiltoniano en la base ortogonal de Krylov es una matriz tridiagonal. Los coeficientes α_i y β_i hallados forman

Algoritmo 1 Iteración de Lanczos

-
- 1: $|\phi_p\rangle = H|\phi_i\rangle - \beta_i|\phi_{i-1}\rangle$
 - 2: $\alpha_i = \langle\phi_i|\psi_p\rangle$
 - 3: $|\phi_{pp}\rangle = |\phi_p\rangle - \alpha_i|\phi_i\rangle$
 - 4: $\beta_{i+1} = \sqrt{\langle\phi_{pp}|\phi_{pp}\rangle}$
 - 5: $|\phi_{i+1}\rangle = \frac{1}{\beta_{i+1}}|\phi_{pp}\rangle$
-

dicha matriz como se muestra en la ecuación [A.2](#).

$$\bar{H}_N = \begin{pmatrix} \alpha_0 & \beta_1 & 0 & 0 & \cdots \\ \beta_1 & \alpha_1 & \beta_2 & 0 & \cdots \\ 0 & \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & \cdots \\ 0 & 0 & \beta_3 & \alpha_4 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

La energía del estado fundamental es el menor autovalor de la matriz tridiagonal \bar{H}_N . Para calcular este autovalor, tenemos que diagonalizar una matriz la matriz \bar{H}_N de $N \times N$. La buena noticia es que se trata de una matriz tridiagonal. Este tipo de matrices son significativamente más fáciles de diagonalizar.

Por último, para calcular el autovector asociado al menor autovalor, supongamos que el autovector asociado al menor autovalor de la matriz \bar{H}_N es $|\psi\rangle$, un vector con N componentes ψ_j . Luego, el autoestado buscado se calcula como se muestra a continuación.

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \psi_j |\phi_j\rangle \quad (\text{A.3})$$

Apéndice B

Código del NRG para la Cadena de Wilson

Se implementó un código en C++ para resolver el problema de la Cadena de Wilson con NRG.

```
#include<iostream>
#include<armadillo>
#include<fstream>
#include <iomanip> //set precision
using namespace std;
using namespace arma;

typedef enum{BLOQUE_PUNTO, PUNTO_BLOQUE, BLOQUE_BLOQUE}joinType;

mat Sgn={{1,0,0,0},{0,-1,0,0},{0,0,-1,0},{0,0,0,1}}; //OPERADOR DE SIGNO

class Block
{
public:
    mat H, Bup, Bdown, Aup, Adown;
    double Hop;

    Block(); //constructor por defecto. inicializa un bloque vacio
    Block(mat h, mat cup, mat cdown, mat cupdaga, mat cdowndaga); //constructor

    void join(Block b1, Block b2, double t); //une dos bloques
    int getDim(); //retorna la dimension del Hamiltoniano
};
```

```

Block::Block(){}

Block::Block(mat h, mat cup, mat cdown, mat cupdaga, mat cdowndaga)
{
    H = h;
    Bup = cup;
    Bdown = cdown;
    Aup = cupdaga;
    Adown = cdowndaga;
}

void Block::join(Block b1, Block b2, double t)
{
    H = kron(b1.H, eye(b2.getDim(), b2.getDim()))
    + t*kron(b1.Aup, b2.Bup)
    + t*kron(b1.Adown, b2.Bdown)
    + t*kron(b1.Bup, b2.Aup)
    + t*kron(b1.Bdown, b2.Adown);
    Bup = kron(eye(b1.getDim(), b1.getDim()), Sgn*b2.Bup);
    Bdown = kron(eye(b1.getDim(), b1.getDim()), Sgn*b2.Bdown);
    Aup = kron(eye(b1.getDim(), b1.getDim()), b2.Aup*Sgn);
    Adown = kron(eye(b1.getDim(), b1.getDim()), b2.Adown*Sgn);
}

int Block::getDim()
{
    return sqrt(H.size());
}

double renormaliza(Block &La, Block &L, uint m)
{
    vec eigval;
    mat eigvec, cob;
    //diagonalizamos la matriz densidad reducida
    eig_sym(eigval, eigvec, La.H);

    if(eigval.size() < m)
    {

```

```

        cob = eigvec; //matriz cambio de base
    }
    else
    {
        cob.set_size(eigvec.n_rows,m);
        for(unsigned int i = 0 ; i < m; i++)
        {
            cob.col(i)=eigvec.col(i);
        }
    }
    //rotamos los operadores
    L.H=cob.t()*La.H*cob;
    L.Bup=cob.t()*La.Bup*cob;
    L.Bdown=cob.t()*La.Bdown*cob;
    L.Aup=cob.t()*La.Aup*cob;
    L.Adown=cob.t()*La.Adown*cob;

    return eigval(0);
}

int main(void)
{
    cout << "Hola NRG Anderson" << endl;
    double U=1;

    //SITO DEL BANIO
    mat H={{0,0,0,0},{0,0,0,0},{0,0,0,0},{0,0,0,0}};
    mat CupDaga={{0,0,1,0},{0,0,0,1},{0,0,0,0},{0,0,0,0}};
    mat CdownDaga={{0,1,0,0},{0,0,0,0},{0,0,0,-1},{0,0,0,0}};
    mat Cup=CupDaga.t();
    mat Cdown=CdownDaga.t();

    //IMPUREZA
    mat HImp={{0,0,0,0},{0,-U/2,0,0},{0,0,-U/2,0},{0,0,0,0}};
    mat Bup=Sgn*Cup;
    mat Bdown=Sgn*Cdown;
    mat Aup=CupDaga*Sgn;
    mat Adown=CdownDaga*Sgn;
    cout<<setprecision(9);

```

```
double e0;
Block L(HImp,Bup,Bdown,Aup,Adown);
for(uint i=1; i<50; i++)
{
    Block a(H,Bup,Bdown,Aup,Adown);
    Block La;
    La.join(L,a,(-1)*pow(2,-(double)(i-1)/2.0));
    e0=renormaliza(La,L,256);
    cout << i+1 << ' ' << e0 <<endl;
}
return 0;
}
```

Apéndice C

Código del DMRG en serie para el Hamiltoniano de Heisenberg unidimensional

Se elaboró un código en lenguaje C++ para resolver el problema del Hamiltoniano de Heisenberg en una dimensión. La estructura es muy parecida a la del NRG. Aquí se detallan las funciones más importantes.

```
class Block
{
    public:
        mat H, Sz, Smas, Smenos;

        Block(); //constructor por defecto. inicializa un bloque vacio
        Block(mat h, mat sz, mat smas, mat smenos); //constructor

        void join(Block b1, Block b2, joinType jt); //une dos bloques
        int getDim();
};
```

La función que une los bloques es:

```
void Block::join(Block b1, Block b2, joinType jt)
{
    H = kron(b1.H, eye(b2.getDim(), b2.getDim()))
    + kron(eye(b1.getDim(), b1.getDim()), b2.H)
    + kron(b1.Sz, b2.Sz)
    + 0.5*kron(b1.Smas, b2.Smenos)
    + 0.5*kron(b1.Smenos, b2.Smas);
```

7 Código del DMRG en serie para el Hamiltoniano de Heisenberg unidimensional

```
if(jt == BLOQUE_PUNTO)
{
    Sz = kron(eye(b1.getDim(), b1.getDim()), b2.Sz);
    Smas = kron(eye(b1.getDim(), b1.getDim()), b2.Smas);
    Smenos = kron(eye(b1.getDim(), b1.getDim()), b2.Smenos);
}
else if(jt == PUNTO_BLOQUE)
{
    Sz = kron(b1.Sz, eye(b2.getDim(),b2.getDim()));
    Smas = kron(b1.Smas, eye(b2.getDim(),b2.getDim()));
    Smenos = kron(b1.Smenos, eye(b2.getDim(),b2.getDim()));
}
else //BLOQUE_BLOQUE - esto no se usa
{
}
}
```

A continuación se muestra la función que realiza la renormalización:

```
uint renormaliza(const mat& psi0, Block& b, uint m, Block& L)
{
    vec eigval;
    mat eigvec, cob; //cob: matriz cambio de base
    mat rho = psi0*psi0.t(); //matriz densidad reducida
    eig_sym(eigval, eigvec, rho); //diagonalizamos la matriz densidad reducida

    if(rho.n_rows<=m)
    {
        L.H=eigvec.t()*b.H*eigvec;
        L.Sz=eigvec.t()*b.Sz*eigvec;
        L.Smas=eigvec.t()*b.Smas*eigvec;
        L.Smenos=eigvec.t()*b.Smenos*eigvec;
    }
    else
    {
        mat cob;
        cob.set_size(eigvec.n_rows,m);
        for(uint i = 0 ; i < m; i++)
        {
```

```

        cob.col(i)=eigvec.col(eigvec.n_cols-1-i);
    }
    L.H=cob.t()*b.H*cob;
    L.Sz=cob.t()*b.Sz*cob;
    L.Smas=cob.t()*b.Smas*cob;
    L.Smenos=cob.t()*b.Smenos*cob;
}
return 0;
}

```

C.1. Programa en paralelo

Se elaboró un programa análogo para resolver el problema planteado anteriormente. Este programa fue codificado en el lenguaje CUDA-C. Este lenguaje se utiliza para programar en paralelo. Los programas en paralelo se ejecutan en la unidad de procesamiento gráfica, GPU por sus siglas en inglés, a diferencia de la CPU, que es donde se ejecutan los programas en serie.

La idea fundamental de la programación en paralelo es realizar una misma tarea en simultáneo. A modo de ejemplo, se puede pensar la suma de vectores. Se tienen dos vectores A y B ambos de la misma longitud L . Se quiere construir el vector $C = A + B$. Un programa en serie para realizar esta tarea, realiza la operación $c_i = a_i + b_i$ de forma secuencial en L unidades de tiempo. Un programa en paralelo realiza estas operaciones por tandas en simultáneo. La cantidad de operaciones que se pueden realizar en cada tanda depende de las capacidades de la GPU.

Además de la suma de vectores, otras tareas que se pueden paralelizar son operaciones con matrices como la multiplicación, el producto externo, la transpuesta y la multiplicación por escalar. Como se vio anteriormente, estas operaciones son utilizadas para resolver la cadena de espines $\frac{1}{2}$.

En la figura C.1 se muestra el tiempo de ejecución para los programas en serie y en paralelo en función de la cantidad de estados almacenados m . Se utilizó un sistema de $N = 200$ espines.

Se ve que para $m = 2^3$ el tiempo de ejecución es mayor para el programa en paralelo. Esto se debe al tiempo que tarda el programa en cargar las librerías para comunicarse con la GPU. Luego, se ve que para $m = 2^4$ los tiempos de ejecución son comparables. A partir de $m = 2^5$ se observa que el tiempo de ejecución es significativamente menor para el programa en paralelo respecto del programa en serie. Esto es un claro indicio de que el DMRG es un método con gran potencial para la paralelización.

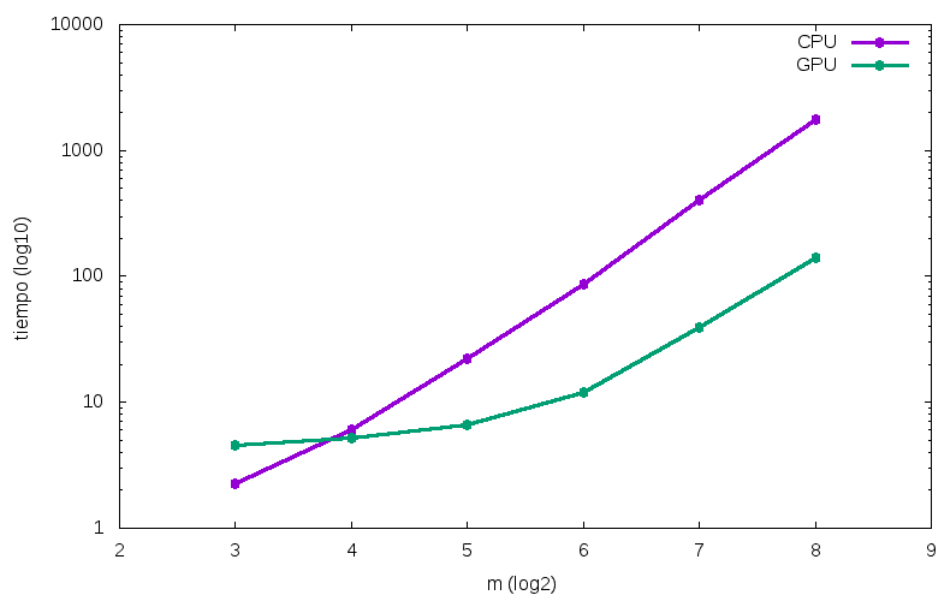


Figura C.1: Tiempo de ejecución de los programas en serie y en paralelo.

Bibliografía

- [1] White, S. R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Physical Review Letters*, **69** (19), 2863–2866, nov 1992. URL <https://doi.org/10.1103/physrevlett.69.2863>. 3
- [2] Hallberg, K. A. New trends in density matrix renormalization. *Advances in Physics*, **55** (5-6), 477–526, jul 2006. URL <https://doi.org/10.1080/00018730600766432>. 3
- [3] Wilson, K. G. The renormalization group: Critical phenomena and the kondo problem. *Rev. Mod. Phys.*, **47**, 773–840, Oct 1975. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.47.773>. 3
- [4] Bulla, R., Costi, T. A., Pruschke, T. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. *Reviews of Modern Physics*, **80** (2), 395–450, apr 2008. URL <https://doi.org/10.1103/revmodphys.80.395>. 5
- [5] Peschel, I., Kaulke, M., Wang, X., Hallberg, K. (eds.) Density-Matrix Renormalization. Springer Berlin Heidelberg, 1999. URL <https://doi.org/10.1007/bfb0106062>. 6, 12
- [6] Wolf, F. A., McCulloch, I. P., Schollwöck, U. Solving nonequilibrium dynamical mean-field theory using matrix product states. *Physical Review B*, **90** (23), dec 2014. URL <https://doi.org/10.1103/physrevb.90.235131>. 7, 30, 38
- [7] White, S. R., Noack, R. M. Real-space quantum renormalization groups. *Physical Review Letters*, **68** (24), 3487–3490, jun 1992. URL <https://doi.org/10.1103/physrevlett.68.3487>. 10
- [8] Feynman, R. P. Statistical Mechanics: A Set Of Lectures (Advanced Books Classics). Westview Press, 1998. URL <https://www.amazon.com/Statistical-Mechanics-Lectures-Advanced-Classics/dp/0201360764?SubscriptionId=0JYN1NVW651KCA56C102&tag=techkie-20&linkCode=xm2&camp=2025&creative=165953&creativeASIN=0201360764>. 12

- [9] Schollwöck, U. The density-matrix renormalization group. *Reviews of Modern Physics*, **77** (1), 259–315, apr 2005. URL <https://doi.org/10.1103/revmodphys.77.259>. 13
- [10] Osborne, T. J., Nielsen, M. A. *Quantum Information Processing*, **1** (1/2), 45–53, 2002. URL <https://doi.org/10.1023/a:1019601218492>. 18
- [11] Chen, P., long Xue, Z., McCulloch, I. P., Chung, M.-C., Cazalilla, M., Yip, S.-K. Entanglement entropy scaling of the XXZ chain. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, **2013** (10), P10007, oct 2013. URL <https://doi.org/10.1088/1742-5468/2013/10/p10007>. 19
- [12] Xiang, T. Density-matrix renormalization-group method in momentum space. *Physical Review B*, **53** (16), R10445–R10448, apr 1996. URL <https://doi.org/10.1103/physrevb.53.r10445>. 22
- [13] Yang, C., Feiguin, A. E. Unveiling the internal entanglement structure of the kondo singlet. *Physical Review B*, **95** (11), mar 2017. URL <https://doi.org/10.1103/physrevb.95.115106>. 23
- [14] He, R.-Q., Lu, Z.-Y. Quantum renormalization groups based on natural orbitals. *Physical Review B*, **89** (8), feb 2014. URL <https://doi.org/10.1103/physrevb.89.085108>. 24
- [15] Holzner, A., Weichselbaum, A., von Delft, J. Matrix product state approach for a two-lead multilevel anderson impurity model. *Physical Review B*, **81** (12), mar 2010. URL <https://doi.org/10.1103/physrevb.81.125126>. 38
- [16] Krumnow, C., Veis, L., Legeza, O., Eisert, J. Fermionic orbital optimization in tensor network states. *Physical Review Letters*, **117** (21), nov 2016. URL <https://doi.org/10.1103/physrevlett.117.210402>. 45
- [17] Fertitta, E., Paulus, B., Barcza, G., Legeza, O. Investigation of metal–insulator-like transition through theab initiodensity matrix renormalization group approach. *Physical Review B*, **90** (24), dec 2014. URL <https://doi.org/10.1103/physrevb.90.245129>. 46
- [18] Vollhardt, D., Byczuk, K., Kollar, M. Dynamical mean-field theory. En: Springer Series in Solid-State Sciences, págs. 203–236. Springer Berlin Heidelberg, 2011. URL https://doi.org/10.1007/978-3-642-21831-6_7. 51
- [19] García, D. J., Hallberg, K., Rozenberg, M. J. Dynamical mean field theory with the density matrix renormalization group. *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 246403, Dec 2004. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.246403>. 51

-
- [20] Kühner, T. D., White, S. R. Dynamical correlation functions using the density matrix renormalization group. *Phys. Rev. B*, **60**, 335–343, Jul 1999. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.60.335>. 52

Agradecimientos

Agradezco a Yuriel Nuñez y Karen Hallberg por todo lo que aprendí y a mis padres Delia y Juan, mi hermano Juan Pablo y mi novia Milagros por la paciencia. Además, agradezco a mis compañeros, los físicos IB14, por todo el apoyo y los buenos momentos que pasé en el Instituto Balseiro.

